

Université de Montréal

Étude du théorème adiabatique par le développement perturbatif

par
Hélène Paquette

11784718

Département de Physique
Faculté des arts et des sciences

Mémoire présenté à la Faculté des études supérieures
en vue de l'obtention du grade de Maître ès sciences (M.Sc.)
en Physique

avril, 2007

© Hélène Paquette, 2007.



dc

3

054

2007

V-014

AVIS

L'auteur a autorisé l'Université de Montréal à reproduire et diffuser, en totalité ou en partie, par quelque moyen que ce soit et sur quelque support que ce soit, et exclusivement à des fins non lucratives d'enseignement et de recherche, des copies de ce mémoire ou de cette thèse.

L'auteur et les coauteurs le cas échéant conservent la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent ce document. Ni la thèse ou le mémoire, ni des extraits substantiels de ce document, ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans l'autorisation de l'auteur.

Afin de se conformer à la Loi canadienne sur la protection des renseignements personnels, quelques formulaires secondaires, coordonnées ou signatures intégrées au texte ont pu être enlevés de ce document. Bien que cela ait pu affecter la pagination, il n'y a aucun contenu manquant.

NOTICE

The author of this thesis or dissertation has granted a nonexclusive license allowing Université de Montréal to reproduce and publish the document, in part or in whole, and in any format, solely for noncommercial educational and research purposes.

The author and co-authors if applicable retain copyright ownership and moral rights in this document. Neither the whole thesis or dissertation, nor substantial extracts from it, may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms, contact information or signatures may have been removed from the document. While this may affect the document page count, it does not represent any loss of content from the document.

Université de Montréal
Faculté des études supérieures

Ce mémoire intitulé:

Étude du théorème adiabatique par le développement perturbatif

présenté par:

Hélène Paquette

a été évalué par un jury composé des personnes suivantes:

Manu Paranjape
président-rapporteur

Richard MacKenzie
directeur de recherche

Sjoerd Roorda
membre du jury

Mémoire accepté le

RÉSUMÉ

Ce mémoire porte sur l'approximation adiabatique et son domaine de validité. Le théorème adiabatique stipule que lorsqu'un système évolue infiniment lentement dans le temps, l'Hamiltonien qui est initialement dans un de ses états propres instantanés évoluera vers l'état instantané final correspondant. La probabilité de transition à un autre état est alors négligeable. Évidemment, aucun système n'évolue infiniment lentement, et c'est pourquoi on utilise l'approximation adiabatique lorsqu'on peut considérer le système comme évoluant suffisamment lentement.

Nous avons élaboré une approche nouvelle et intuitive au problème de la mécanique quantique dépendante du temps, qui est fortement utile lorsque l'évolution de l'Hamiltonien est lente. Par un développement perturbatif, l'état du système est écrit en série de puissance. Ainsi, chaque terme de la série correspond à une séquence d'évolution adiabatique durant laquelle le système demeure dans un état propre instantané de l'Hamiltonien, ponctuée de transitions d'un état à l'autre. Le premier terme de la série est donc l'évolution adiabatique standard, et les termes suivants sont les corrections aux différents ordres. On peut représenter ce résultat sous forme de diagramme, où à chaque ordre on permet une transition supplémentaire. Mais pour utiliser ce développement, la série doit converger. Nous trouverons que la convergence dépend du temps total de l'évolution, un paramètre très peu utilisé pour discuter de la validité de l'approximation adiabatique dans la littérature.

Mots clés : mécanique quantique, dépendance en temps, évolution, transition.

ABSTRACT

The subject of this work is the adiabatic approximation and its domain of validity. The adiabatic theorem states that a time-dependent Hamiltonian initially in one of his instantaneous eigenstates will evolve towards the corresponding final instantaneous eigenstate when the system evolves infinitely slowly in time. The transition probability to another eigenstate can then be neglected. But no system evolves infinitely slowly, and this is why we use the adiabatic approximation when the system evolves slowly enough.

A new and intuitive perturbative approach to time-dependent quantum mechanics problems is presented, which is useful in situations where the evolution of the Hamiltonian is slow. By a perturbative expansion, the state of the system is written as a power series. Each term of the series corresponds to a sequence of adiabatic evolutions, during which the system remains in an instantaneous eigenstate of the Hamiltonian, punctuated by transitions from one state to another. The first term of this series is the standard adiabatic evolution, and the next terms are the corrections to different orders. We can represent this result with diagrams, where in each order we allow a supplementary transition to occur. But to use this expansion, the series must converge. We will find that the convergence is dependent of the total time of evolution, a parameter not often used to discuss the validity of the approximation in the literature.

Keywords: quantum mechanics, time-dependant, transition, evolution.

TABLE DES MATIÈRES

RÉSUMÉ	iii
ABSTRACT	iv
TABLE DES MATIÈRES	v
LISTE DES FIGURES	vii
DÉDICACE	viii
REMERCIEMENTS	ix
CHAPITRE 1 : INTRODUCTION	1
CHAPITRE 2 : UNE INTRODUCTION AU THÉORÈME ET À L'AP- PROXIMATION ADIABATIQUES	5
2.1 L'approximation adiabatique et son critère de validité	5
2.2 Les récents développements	14
CHAPITRE 3 : LE DÉVELOPPEMENT PERTURBATIF ET LA REPRÉSENTATION EN DIAGRAMME	20
3.1 Le développement perturbatif	20
3.2 La représentation en diagramme	26
3.3 La convergence du développement	27
CHAPITRE 4 : LE CALCUL DE L'ERREUR SUR L'APPROXIMA- TION ADIABATIQUE PAR RÉCURRENCE	34
4.1 La forme générale de l'amplitude	34
4.2 La récurrence de la matrice X	36

CHAPITRE 5 : UN EXEMPLE : L'OSCILLATEUR HARMONIQUE	
AVEC UN CENTRE DE MASSE OSCILLANT . .	41
5.1 Le calcul de l'amplitude pour l'oscillateur	41
5.2 Induction de la grandeur des A selon l'ordre et le niveau	46
CHAPITRE 6 : CONCLUSION	49
BIBLIOGRAPHIE	51

LISTE DES FIGURES

2.1	Niveaux d'énergie évoluant dans le temps dans le cas adiabatique. Le système est initialement dans l'état $ n(0)\rangle$ et reste dans le n ème état propre instantané tout au long de l'évolution.	7
2.2	Évolution de $\vec{V}^a(t)$ dans l'espace. Il décrit un cône autour de l'axe z avec un angle d'ouverture θ_a	15
2.3	Évolution de $\vec{V}^b(t)$ dans l'espace. Il décrit un cône autour d'un axe avec un angle d'ouverture différent de $\vec{V}^a(t)$	17
5.1	Niveaux possibles de l'oscillateur selon l'ordre, ainsi que l'ordre de grandeur pour chaque possibilité.	47

Aux Babyloniens

REMERCIEMENTS

Je voudrais premièrement remercier mon directeur de recherche, Richard MacKenzie. Nos discussions ont porté fruit, je dépose avec de bons souvenirs. J'ai vraiment apprécié être son étudiante.

Suivent ensuite mes camarades physiciens et physiciennes, cette épreuve des études graduées nous ayant liés pour la vie. De Montréal à Babylone, nous serons là.

Spéciale dédicace aux bananes théoriques volantes, ces rats m'ayant laissée seule sur le navire à la dérive. Avec ma grande compréhension de votre geste, je ne vous en tiens pas rigueur.

Et à banane Julien, un remerciement spécial, car quand on est deux, ça va deux fois mieux !

Sans oublier ma mère, qui de ses bons conseils et commentaires, me motivait. Fallait bien quelqu'un !

CHAPITRE 1

INTRODUCTION

La mécanique quantique exploite la dualité onde-corpuscule des particules afin de décrire les phénomènes atomiques et subatomiques. Elle caractérise les particules par leur fonction d'onde, et la dynamique de leur évolution est déterminée par l'équation de Schrödinger :

$$H(t)\Psi(t) = i\hbar \frac{d}{dt}\Psi(t), \quad (1.1)$$

où $H(t)$ est l'Hamiltonien et représente l'énergie mécanique totale du système. L'Hamiltonien dicte l'évolution du système dans le temps.

Lorsqu'on étudie un système en mécanique quantique, on cherche à résoudre cette équation afin de trouver la fonction d'onde. Cependant, la plupart des systèmes quantiques n'ont pas une équation de Schrödinger que l'on peut résoudre analytiquement, et de nombreuses méthodes d'approximation et de développement existent. Ce mémoire portera sur une méthode employée lorsque le système évolue lentement : l'approximation adiabatique.

Cette approximation provient du théorème du même nom, élaboré en premier par Ehrenfest puis démontré par Born et Fock en 1928. Lorsqu'un Hamiltonien change suffisamment lentement dans le temps, on peut approximer les solutions de l'équation de Schrödinger par les états propres stationnaires de l'Hamiltonien instantané, c'est-à-dire qu'un état propre particulier à un certain temps évoluera de manière continue vers l'état propre correspondant à un temps ultérieur. Si une particule est initialement dans l'état m :

$$|\psi(0)\rangle = |m(0)\rangle, \quad (1.2)$$

et que nous laissons cette particule évoluer dans le temps, alors, selon l'approxima-

tion adiabatique, son état au temps t sera :

$$|\psi(t)\rangle \simeq e^{-i \int_0^t E_m(t') dt'} |m(t)\rangle, \quad (1.3)$$

où $|m(t)\rangle$ est l'état initial ayant évolué dans le temps. La phase devant cet état est la phase dynamique, (nous posons la phase de Berry nulle, voir la section 2.1 du présent mémoire) provenant de l'opérateur d'évolution. Tout au long de ce mémoire, nous travaillerons dans les unités naturelles, où $\hbar = 1$.

Cette approximation doit être utilisée avec discernement et être appliquée seulement dans les cas où elle est valide. Le critère standard utilisé par certains auteurs pour vérifier la validité de l'approximation est relié aux échelles d'énergie et de temps :

$$\left| \frac{\langle \dot{m}(t) | n(t) \rangle}{E_m(t) - E_n(t)} \right| \ll 1, \quad m \neq n, \quad (1.4)$$

où $|n(t)\rangle$ est un état propre de l'Hamiltonien au temps t possédant une énergie $E_n(t)$ et $\langle \dot{m}(t) |$ est la dérivée par rapport au temps de l'état initial ayant évolué, possédant une énergie $E_m(t)$. Cette condition implique que la différence d'énergie entre ces deux niveaux doit être beaucoup plus grande que le changement des états dans le temps afin que les transitions soient peu probables.

Ce critère a été remis en question récemment. Certains chercheurs ont démontré son inefficacité à déterminer si un système évolue adiabatiquement ou non, et ont proposé que l'approximation adiabatique était incohérente. En effet, nous verrons que l'application aveugle de ce critère inclut des systèmes qui n'évoluent pas de manière adiabatique. Dans ce mémoire, on mettra l'accent sur les différentes échelles de temps et d'énergie, afin de bien comprendre l'essence de ce critère qui, appliqué correctement, est un très bon indicateur de l'adiabaticité d'un système.

Ce sujet soulève beaucoup de passion depuis les dernières années car une application technologique lui est maintenant associée. Dans le domaine de l'informatique, plus précisément de l'informatique quantique, on croit pouvoir faire une nouvelle

génération d'ordinateur quantique qui fonctionnerait à l'aide du théorème adiabatique. L'unité indivisible de l'information classique est le bit ; il prend la valeur 0 ou 1. En informatique quantique, on l'appelle le qubit ; c'est une fonction d'onde dans une base à deux états, $|+\rangle$ et $|-\rangle$.

Un qubit, grâce à la superposition des états propres, peut être dans un état $(|+\rangle \pm |-\rangle)/\sqrt{2}$. Il existe différentes techniques pour introduire ce phénomène quantique à l'informatique. Certains chercheurs privilégient une technique entrecroisant l'informatique classique et quantique, où les qubits passent par des portes logiques pouvant jouer sur la phase ou sur l'orientation dans le plan $(|+\rangle, |-\rangle)$ du qubit. Ces portes fonctionnent à l'aide du théorème adiabatique, pour s'assurer qu'il n'y ait pas de transitions imprévisibles lors du passage dans les portes logiques. Une autre technique consiste à faire évoluer adiabatiquement un Hamiltonien vers un état final qui encoderait la solution du problème [3]. Un ordinateur quantique pourrait donc effectuer des calculs en agissant sur les qubits grâce à une influence externe, par exemple un champ magnétique sur des particules de spin $\frac{1}{2}$, résultant en une évolution adiabatique du qubit. La superposition des états permet de transporter plus d'information dans un qubit que dans un bit classique, ce qui a pour effet de réduire le temps de résolution de certains problèmes. Le grand défi de l'informatique quantique étant de pouvoir résoudre des problèmes dans un temps polynomial des problèmes classiquement résolus dans un temps exponentiel, les qubits pourraient être la voie de l'informatique du futur.

Au premier chapitre de ce mémoire, on débutera par énoncer le théorème adiabatique. On fera une petite digression sur l'importance des phases, en abordant la phase de Berry. On verra le critère de validité de l'approximation adiabatique et l'implication des échelles de temps et des échelles d'énergie dans la détermination d'un système adiabatique. Cela nous amènera à la controverse soulevée par Tong et al. récemment sur l'incohérence de l'approximation adiabatique. On exposera alors leur argumentation, et on démontrera qu'ils ont appliqué le critère de validité à un système qui n'évoluait pas adiabatiquement.

Au deuxième chapitre, on élaborera une nouvelle méthode de calcul, dite perturbative, afin de décrire l'évolution d'un état initial dans le temps. Cette nouvelle méthode de calcul est particulièrement intéressante si on l'applique à des systèmes évoluant lentement dans le temps. De plus, elle est intuitive et mène à une description sous forme de diagramme de l'évolution d'un état. Cependant, pour être utile, le développement perturbatif de nos états doit converger. Nous terminerons donc ce chapitre en nous assurant de la convergence de cette série, ce qui nous amènera au critère de validité de l'approximation adiabatique. Ce chapitre se base sur un article que R.Mackenzie, E. Marcotte et moi-même avons cosigné [11].

Au troisième chapitre, on réexprimera l'amplitude de se trouver dans un certain état à un temps donné sous forme matricielle, dont on montrera la récurrence aux différents ordres. Cela sera essentiel pour démontrer la convergence du développement perturbatif et pour une compréhension approfondie des échelles de temps et d'énergie. Ce travail a été fait en collaboration avec J. Pinel et R.Mackenzie.

Finalement, au quatrième chapitre, on appliquera toutes ces nouvelles connaissances à un système particulier se résolvant analytiquement : l'oscillateur harmonique dont le centre de masse en mouvement varie de manière sinusoïdale. On pourra alors démontrer la puissance du développement perturbatif et déduire le critère de validité de l'approximation adiabatique pour ce système. Cet exemple est un apport original de moi.

CHAPITRE 2

UNE INTRODUCTION AU THÉORÈME ET À L'APPROXIMATION ADIABATIQUES

Ce chapitre est une revue des travaux faits précédemment, soit par les grands noms de la mécanique quantique, tels Born et Fock, soit par des chercheurs contemporains, tels Tong et Berry. On énoncera le théorème adiabatique et l'approximation qui en découle, fera un aparté sur les phases, exposera le problème du domaine de validité de l'approximation adiabatique et on conclura avec notre apport à cette polémique.

2.1 L'approximation adiabatique et son critère de validité

Les processus adiabatiques ont été étudiés bien avant l'avènement de la mécanique quantique. Ils sont à la limite entre la dynamique et la statique ; un système est dit adiabatique s'il évolue infiniment lentement. Évidemment, cela est une approximation. Ce concept a été introduit en mécanique classique par Boltzmann, et on peut facilement en faire une illustration. Supposons un pendule dont le support est posé sur une plate-forme en mouvement. Il oscillera à la même fréquence si la plate-forme est au repos que si elle bouge très lentement par rapport à la période du pendule. Dans cet exemple, il y a deux échelles de temps impliquées : la période d'oscillation du pendule et le temps de déplacement de la plate-forme. Le changement graduel des conditions externes pourra être négligé si le pendule oscille plusieurs fois avant un déplacement notable de la plate-forme. C'est la condition pour que l'approximation soit valide.

Le concept d'adiabadicité a été appliqué en mécanique quantique par Ehrenfest dès les débuts de cette théorie qui allait transformer notre vision de l'univers microscopique. C'est dans le développement de la théorie atomique, principalement dirigé par Sommerfeld et Bohr, que l'utilisation de l'évolution lente a été nécessaire

pour étudier l'atome d'Hydrogène [4]. La première preuve en mécanique quantique moderne a été élaborée par Born et Fock en 1928 [6]. Une autre version de la preuve peut être trouvée dans Messiah [7]. Ici, on se contentera d'énoncer le théorème, pour ensuite étudier l'approximation qui en découle.

Le théorème adiabatique stipule qu'un système dont la dynamique est dictée par un Hamiltonien dépendant du temps restera, dans la limite d'une évolution infiniment lente du système, dans l'état propre ayant évolué à partir de l'état propre initial. Plus précisément, on suppose que l'Hamiltonien peut s'écrire comme

$$H(t) = E\hat{H}(t/\tau), \quad (2.1)$$

où $\hat{H}(s)$ est un opérateur hermitien sans dimension dépendant de la variable sans dimension $s = t/\tau$ de manière lisse et E est une constante positive avec des dimensions d'énergie. E et τ représente respectivement l'échelle d'énergie et de temps de l'évolution de l'Hamiltonien. Nous ferons évoluer l'Hamiltonien vers son état propre final infiniment lentement. Pour se faire, nous ferons tendre τ vers l'infini avec $s = t/\tau$ fixe. Il est donc utile de réécrire l'équation de Schrödinger (1.1) en terme de s au lieu de t . En définissant $\epsilon = (E\tau)^{-1}$, on obtient :

$$\hat{H}(s) |\Psi(s)\rangle = i\epsilon \frac{d}{ds} |\Psi(s)\rangle. \quad (2.2)$$

On définit les états propres instantanés et énergies instantanées comme les solutions d'une famille d'équations de Schrödinger indépendantes du temps paramétrisées par s ,

$$\hat{H}(s) |n(s)\rangle = \hat{E}_n(s) |n(s)\rangle, \quad (2.3)$$

où E dépend de la variable sans dimension s et l'on choisit la phase des états tel que $\langle n(t) | \dot{n}(t) \rangle = 0$, comme cela sera expliqué plus loin dans cette section. Supposons que l'état initial du système est $|0(0)\rangle$, qui n'est pas nécessairement l'état fondamental, et que la différence d'énergie de cet état avec les autres états du spectre est au minimum l'unité. Le théorème adiabatique stipule alors que

lorsque $\epsilon \rightarrow 0$, la solution de (2.2) tend vers

$$|\psi_{ad}(s)\rangle \simeq e^{(-i/\epsilon) \int_0^s \hat{E}_0(s') ds'} |0(s)\rangle, \quad (2.4)$$

avec une erreur de l'ordre de ϵ .

On utilise l'approximation adiabatique lorsqu'il est impossible de résoudre analytiquement l'équation de Schrödinger et que le système étudié évolue lentement. Si l'Hamiltonien, initialement dans un de ses états propres, change suffisamment lentement dans le temps, on peut approximer l'état final instantané du système comme étant l'état initial instantané ayant évolué dans le temps (1.3). Il y a donc une continuité des états tout au long de l'évolution. Un schéma représentant une évolution adiabatique est présenté ci-dessous. On suppose un spectre discret et non-dégénéré pour faciliter la discussion, mais le cas d'un spectre quelconque peut être traité.

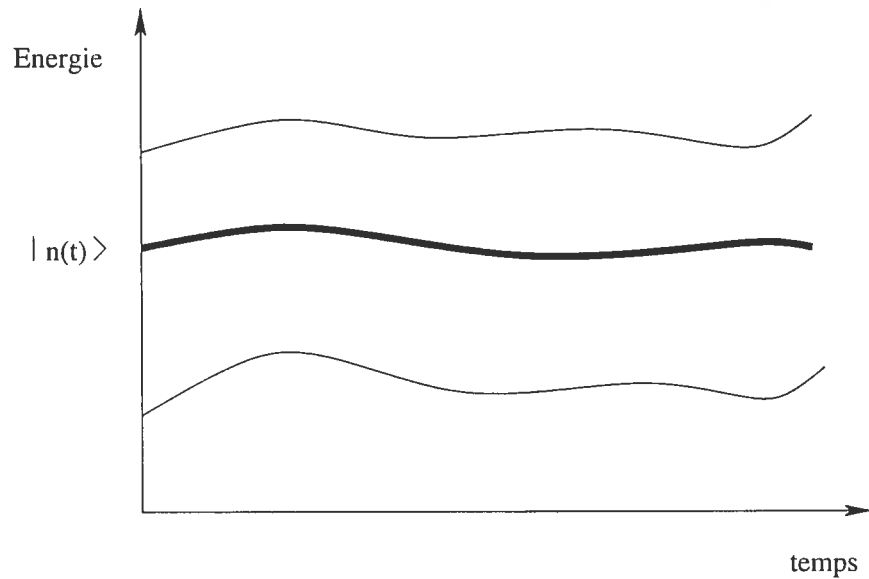


FIG. 2.1 – Niveaux d'énergie évoluant dans le temps dans le cas adiabatique. Le système est initialement dans l'état $|n(0)\rangle$ et reste dans le n ième état propre instantané tout au long de l'évolution.

Dans cette section, on retrouvera le critère standard pour vérifier la validité de

l'approximation, on discutera de la phase de Berry et on verra également le cas des résonances.

On souhaite résoudre l'équation de Schrödinger (1.1), dont les solutions instantanées (à un temps précis) ont la forme

$$H(t) |n(t)\rangle = E_n(t) |n(t)\rangle, \quad (2.5)$$

où les $|n(t)\rangle$ sont les états propres instantanés de $H(t)$ et sont orthonormaux, discrets et non-dégénérés. À un temps quelconque, la fonction d'onde totale peut s'écrire

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) e^{-i \int_0^t E_n(t') dt'} |n(t)\rangle. \quad (2.6)$$

L'état de la particule s'exprime donc en terme des énergies et états propres instantanés de l'Hamiltonien.

On remet l'expression (2.6) dans l'équation de Schrödinger (1.1). On dérive le côté droit par rapport au temps et sur le côté gauche, on utilise (2.5). Le terme sur le côté gauche étant identique à un des termes sur le côté droit, on les élimine et on trouve :

$$0 = i \left[\sum_n \dot{a}_n(t) e^{-i \int_0^t E_n(t') dt'} |n(t)\rangle + \sum_n a_n(t) e^{-i \int_0^t E_n(t') dt'} |\dot{n}(t)\rangle \right]. \quad (2.7)$$

On applique ensuite $\langle k(t)|$ et on utilise la propriété d'orthonormalité ($\langle k(t)|n(t)\rangle = \delta_{kn}$) :

$$0 = \dot{a}_k(t) e^{-i \int_0^t E_k(t') dt'} |k(t)\rangle + \sum_n a_n(t) e^{-i \int_0^t E_n(t') dt'} \langle k(t)|\dot{n}(t)\rangle. \quad (2.8)$$

Puis, on isole $\dot{a}_k(t)$:

$$\dot{a}_k(t) = - \sum_n a_n(t) e^{-i \int_0^t (E_n(t') - E_k(t')) dt'} \langle k(t)|\dot{n}(t)\rangle. \quad (2.9)$$

Jusqu'à maintenant, nous n'avons fait aucune approximation ; l'expression (2.9) est toujours vraie. Le moment est idéal pour faire une petite parenthèse sur la phase de Berry. Que choisit-on pour $\langle n(t) | \dot{n}(t) \rangle$? Ce terme est inclu dans $\dot{a}_k(t)$. On va montrer que ce produit est purement imaginaire, puis qu'un choix approprié de la dépendance de $|n\rangle$ par rapport au temps fera en sorte que $\langle n(t) | \dot{n}(t) \rangle = 0$.

Premièrement, la condition d'orthonormalité peut s'écrire

$$\langle n(t) | n(t) \rangle = 1. \quad (2.10)$$

En prenant la dérivée par rapport au temps de cette équation, on obtient :

$$\langle n(t) | \dot{n}(t) \rangle + \langle \dot{n}(t) | n(t) \rangle = 0, \quad (2.11)$$

que l'on peut écrire sous une autre forme ;

$$\begin{aligned} \langle n(t) | \dot{n}(t) \rangle &= - \langle \dot{n}(t) | n(t) \rangle \\ &= - \langle n(t) | \dot{n}(t) \rangle^*. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Ceci implique que le produit de l'état $|n\rangle$ avec sa dérivée est un nombre purement imaginaire :

$$\langle n(t) | \dot{n}(t) \rangle = i\alpha(t) \quad \text{où} \quad \alpha \in \mathbb{R}. \quad (2.13)$$

En mécanique quantique, les états propres de l'Hamiltonien sont définis à une phase près ; il y a une liberté dans les phases associée à la condition (2.10). En effet, en redéfinissant les états propres de $H(t)$ de la manière suivante :

$$|n'(t)\rangle \equiv e^{i\gamma(t)} |n(t)\rangle, \quad (2.14)$$

on conserve la condition d'orthonormalité. Avec cette nouvelle définition, on peut

effectuer le produit

$$\begin{aligned}\langle n'(t) | \dot{n}(t) \rangle &= \langle n(t) | e^{-i\gamma(t)} [i\dot{\gamma}(t)e^{i\gamma(t)} | n(t) \rangle + e^{i\gamma(t)} |\dot{n}(t)\rangle] \\ &= i\dot{\gamma}(t) + i\alpha(t).\end{aligned}\quad (2.15)$$

On peut alors choisir $\gamma(t) = -\int_0^t \alpha(t') dt'$ et ainsi

$$\langle n'(t) | \dot{n}(t) \rangle = 0, \quad \forall n, t. \quad (2.16)$$

Cette façon de redéfinir la phase d'un état a laissé croire à la communauté scientifique pendant des décennies que la phase n'avait aucune signification physique. C'est grâce au travail de Berry [2] que l'on réalisa qu'un Hamiltonien évoluant sur un cycle complet, c'est-à-dire un Hamiltonien dont l'état final est au même point que l'état initial, présente une phase relative entre l'état final et initial qui n'est pas arbitraire et qui comporte de profondes implications physiques. C'est la phase géométrique, qui dépend du trajet parcouru par l'état pendant le cycle. Depuis, les phases géométriques relatives ont été observées à maintes reprises, comme dans l'effet Aharonov-Bohm [15], qui est un cas particulier (topologique) de phase géométrique. (Sur les phases et le théorème adiabatique, voir également [1]). Ici, le choix de phase (2.16) est valide localement ; on ne fait pas un cycle fermé.

Revenons maintenant à notre expression (2.9) ; $\dot{a}_k(t)$ répond exactement à l'équation de Schrödinger. C'est ici que nous allons supposer l'évolution adiabatique de notre système. Puisque notre Hamiltonien varie très lentement dans le temps, on approxime $a_n(t)$, $E_n(t)$, $E_k(t)$ et le produit $\langle k(t) | \dot{n}(t) \rangle$ comme des constantes dans le temps. Cette supposition n'est pas nécessaire, elle n'est qu'un cas particulier, mais on démontrera par la suite que nous pouvons arriver à la même conclusion en n'effectuant pas ces approximations. Toutefois, cette supposition a l'avantage d'illustrer la situation de manière claire. On va supposer que l'état initial de la particule à $t = 0$ est $|m\rangle$. Or, puisque a_n est une constante, on peut le remplacer

par δ_{nm} dans (2.9) :

$$\dot{a}_k(t) \simeq -e^{-i(E_m - E_k)t} \langle k | \dot{m} \rangle, \quad k \neq m. \quad (2.17)$$

L'indice k ne peut être égale à m par le choix de phase (2.16). On peut intégrer par rapport au temps sur chaque côté de la dernière équation :

$$a_k(t) \simeq -i \frac{\langle k | \dot{m} \rangle}{E_m - E_k} (e^{-i(E_m - E_k)t} - 1), \quad k \neq m. \quad (2.18)$$

On voit alors que l'amplitude $a_k(t)$ oscille dans le temps et n'a pas de changement progressif sur une longue période même si le système évolue. $|a_k(t)|^2$ étant la probabilité que le système se retrouve au temps t dans l'état k , différent de l'état initial m , on constate que si

$$\left| \frac{\langle k(t) | \dot{m}(t) \rangle}{E_m - E_k} \right| \ll 1, \quad k \neq m, \quad (2.19)$$

la transition est peu probable ; c'est le critère standard pour l'approximation adiabatique. On remarque qu'on aurait pu trouver directement (2.19) à partir de (2.9). En intégrant sur chaque côté de cette équation par rapport au temps, l'intégrale de droite tend vers 0 si le facteur de phase de l'exponentielle est grand par rapport à la variation de l'élément de matrice. En effet, si il y a peu de changement de l'élément de matrice pendant une période de l'exponentielle, alors l'aire sous la courbe tend vers 0. On obtient donc la condition (2.19) en insistant que $a_k(t)$ doit être petit.

Revenons maintenant à l'équation (2.6). Si le taux de variation des états est petit par rapport à leur différence d'énergie, la probabilité de présence du système dans un autre état que l'état initial ayant évolué dans le temps tend vers zéro, donc $a_m(t)$ tend vers 1 et l'état final du système sera, au temps T ;

$$|\psi(t)\rangle \simeq e^{-i \int_0^t E_m(t') dt'} |m(t)\rangle, \quad (2.20)$$

où on a posé la phase de Berry comme étant nulle. C'est l'approximation adiabatique.

tique.

Cependant, les résonances sont une exception à cette règle, il faut donc utiliser le critère de validité avec précaution. Si l'Hamiltonien oscille à une fréquence près de celle d'une transition entre deux états, alors il y a une forte probabilité que la transition ait lieu, et ce, peu importe si le système répond au critère de lenteur (2.19). L'approximation adiabatique n'est pas valide dans ce cas, car on ne peut négliger la dépendance en temps de $\langle k(t) | \dot{n}(t) \rangle$ et le passage de l'équation (2.17) à (2.18) n'est pas permis. Voyons cela de plus près.

On pose que l'Hamiltonien peut être divisé en deux parties distinctes, une étant constante et l'autre étant très petite mais oscillant à une fréquence ω :

$$H(t) = H_0 + H' \sin \omega t, \quad H' \ll H_0, \quad (2.21)$$

où H' et H_0 sont des constantes dans le temps. On peut facilement montrer, en prenant la dérivée par rapport au temps de (2.5) et en appliquant $\langle k |$ ($k \neq n$), que

$$\langle k(t) | \dot{n}(t) \rangle = \frac{\langle k(t) | \frac{dH}{dt} | n(t) \rangle}{E_n(t) - E_k(t)}. \quad (2.22)$$

Dans notre exemple,

$$\frac{dH}{dt} = \omega H' \cos \omega t. \quad (2.23)$$

En utilisant l'expression (2.9) avec (2.22) et (2.23), on obtient :

$$\dot{a}_k(t) = - \sum_n a_n(t) e^{-i \int_0^t (E_n(t') - E_k(t')) dt'} \omega \cos \omega t \frac{\langle k(t) | H' | n(t) \rangle}{E_n(t) - E_k(t)}. \quad (2.24)$$

On suppose maintenant que l'on peut négliger la dépendance en temps de $a_n(t)$, $E_n(t)$ et $E_k(t)$, puisque notre Hamiltonien varie peu ($H' \ll H_0$). Comme on l'a vu auparavant, a_n étant une constante, on le remplace par δ_{nm} dans (2.24) :

$$\dot{a}_k(t) \simeq - e^{-i(E_m - E_k)t} \omega \cos \omega t \frac{\langle k(t) | H' | m(t) \rangle}{E_m - E_k}. \quad (2.25)$$

Pour bien voir la résonance, on définit $\omega_{km} = E_k - E_m$, puisqu'on travaille dans les unités naturelles. En réécrivant le cosinus sous la forme d'exponentielles, l'équation (2.25) devient :

$$\dot{a}_k(t) \simeq \frac{\omega \langle k(t) | H' | m(t) \rangle}{2\omega_{km}} (e^{i(\omega_{km}+\omega)t} + e^{i(\omega_{km}-\omega)t}). \quad (2.26)$$

Pour intégrer, on doit également supposer que les états propres $|m\rangle$ et $|k\rangle$ sont indépendants du temps, alors :

$$a_k(t) \simeq \frac{\omega \langle k | H' | m \rangle}{2i\omega_{km}} \left(\frac{e^{i(\omega_{km}+\omega)t} - 1}{\omega_{km} + \omega} + \frac{e^{i(\omega_{km}-\omega)t} - 1}{\omega_{km} - \omega} \right). \quad (2.27)$$

On voit clairement que lorsque $\omega_{km} \approx \pm\omega$, la probabilité d'être dans un état autre que l'initial est grande, et par conséquent, l'approximation adiabatique n'est pas valide. Puisque $H' \ll H_0$, il est clair que les états varient très peu, alors $\langle k(t) | \dot{n}(t) \rangle$ est très petit, ce qui fait en sorte que le critère (2.19) est rencontré, et ce, même si ce système n'évolue pas de manière adiabatique. C'est pour cette raison que dans son exposé sur le théorème adiabatique, Messiah [7] met l'accent sur l'importance des différentes échelles en jeu. Pour avoir un système réellement adiabatique, l'échelle d'énergie $E \equiv E_k - E_n$ doit être beaucoup plus grande que la fréquence de l'Hamiltonien, allant comme $1/\tau$, où τ est le temps d'évolution caractéristique de l'Hamiltonien. Dans ces conditions, il est presque impossible au système de changer d'état par lui-même. La condition de lenteur s'exprime donc comme :

$$E\tau \gg 1. \quad (2.28)$$

Dans le cas discuté ici, nous devons avoir que $\omega \ll \omega_{km}$, c'est-à-dire que la fréquence selon laquelle l'Hamiltonien oscille doit être beaucoup plus petite que la fréquence de Bohr entre le niveau initial et les autres niveaux. Cela élimine toutes les résonances. Comme le montre la figure 2.1, les niveaux d'énergie d'un système adiabatique sont suffisamment distancés du niveau initial pour que la probabilité de transition soit réduite.

2.2 Les récents développements

Depuis un article de Marzlin et Sanders [5] prétendant avoir trouvé une incohérence dans l'approximation adiabatique, plusieurs articles débattant sur ce sujet [8, 11–13] ont été publiés. Particulièrement, un article de Tong et al. [14] portant sur un exemple concret d'une particule de spin 1/2 dans un champ magnétique a attiré notre attention.

Tong et al. étudient le comportement de deux systèmes, décrits par les Hamiltoniens $H^a(t)$ et $H^b(t)$, étant reliés entre eux par

$$H^b(t) = -U^{a\dagger}(t)H^a(t)U^a(t), \quad (2.29)$$

où $U^a(t)$ est l'opérateur d'évolution du système A. Cette relation entre les deux systèmes implique que l'opérateur d'évolution pour le système B est $U^b(t) = U^{a\dagger}(t)$. Ces systèmes maintenant bien définis, ils démontrent que lorsque le système A remplit la condition adiabatique (2.19), le système B en fait de même. Nous allons nommer ce critère la condition *a priori*, car c'est un critère auquel on peut soumettre notre système sans avoir à le résoudre. Ils montrent ensuite que si le système A évolue bien adiabatiquement, il remplit le critère que nous nommerons *a posteriori*, car on ne peut vérifier ce critère qu'après avoir déterminé l'évolution du système :

$$|\langle n^a(t) | U^a(t) | n^a(0) \rangle| \approx 1. \quad (2.30)$$

Si le système est adiabatique, l'état initial que l'on fait évoluer en appliquant l'opérateur d'évolution sera approximativement le même que l'état final du système.

Finalement, les auteurs de [14] montrent que le système B ne possède pas du tout le même critère *a posteriori* que le système A lorsqu'on le réécrit en terme des variables de ce dernier. Il peut donc y avoir des situations où les deux systèmes remplissent la condition *a priori*, mais où la condition *a posteriori* n'est pas remplie par l'un des deux systèmes, ce qui démontre que la condition standard (2.19) n'est pas suffisante. Ils supposent alors qu'il y a une incohérence dans le théorème

adiabatique, au lieu de se demander si leur application du critère standard est justifiée.

Habituellement, on ne peut vérifier le critère *a posteriori* analytiquement car les systèmes où l'on utilise l'approximation adiabatique ne se résolvent pas exactement. Cependant, pour tester la validité de l'approximation, Tong étudie un des rares systèmes où la solution exacte se trouve, afin de la comparer à la solution approximée ; il s'agit d'une particule de spin 1/2 dans un champ magnétique tournant lentement autour d'un axe. Plus précisément, l'Hamiltonien du premier système peut s'écrire :

$$H^a(t) = -\frac{\omega_0}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{V}^a(t), \quad (2.31)$$

où $\vec{V}^a(t) = (\sin \theta_a \cos \omega_a t, \sin \theta_a \sin \omega_a t, \cos \theta_a)$. Le champ magnétique effectue donc une précession à une fréquence ω_a autour de l'axe z avec un angle d'ouverture θ_a .

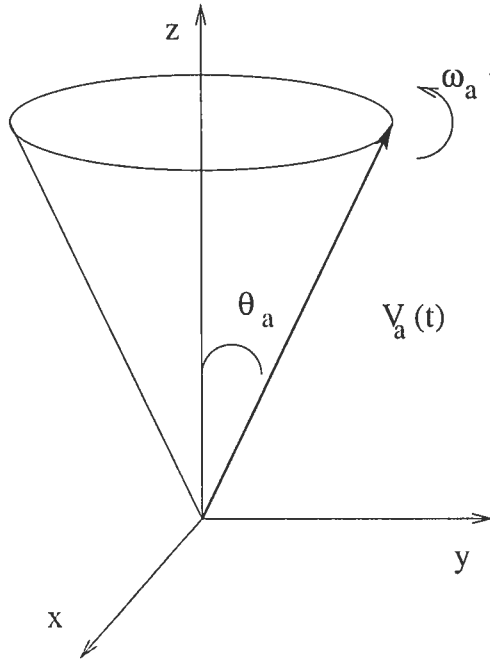


FIG. 2.2 – Évolution de $\vec{V}^a(t)$ dans l'espace. Il décrit un cône autour de l'axe z avec un angle d'ouverture θ_a

Pour ce système, on peut montrer que la condition *a priori* (2.19) s'écrit ainsi :

$$\left| \frac{\omega_a \sin \theta_a}{\omega_0} \right| \ll 1, \quad (2.32)$$

alors que la condition *a posteriori* (2.30) est :

$$\left| \frac{\omega_a \sin \theta_a}{\bar{\omega}_a} \sin \bar{\omega}_a t / 2 \right| \ll 1, \quad (2.33)$$

où $\bar{\omega}_a \equiv \sqrt{\omega_0^2 + 2\omega_0\omega_a \cos \theta_a + \omega_a^2}$. Le lecteur intéressé à la méthode employée pour retrouver ces deux conditions peut consulter le mémoire de J. Pinel [9], qui contient également une étude approfondie des systèmes de particule de spin 1/2 dans un champ magnétique évoluant lentement.

Passons maintenant au système B. Nous pouvons écrire l'Hamiltonien de ce système de la même manière que le système A, c'est-à-dire :

$$H^b(t) = -\frac{\omega_0}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{V}^b(t), \quad (2.34)$$

où $\vec{V}^b(t)$ a une forme plus complexe que $\vec{V}^a(t)$, que l'on trouve en passant au système B grâce à l'équation (2.29). Il décrit un champ magnétique dans la direction $-\hat{z}$ incliné d'un angle θ_a par rapport à l'axe des y et tournant à une fréquence $\omega_b = \bar{\omega}_a$ autour d'un axe $\hat{n} = ((\omega_0 \cos \theta_a + \omega_a)/\bar{\omega}_a)\hat{z} + (\omega_0 \sin \theta_a/\bar{\omega}_a)\hat{x}$. L'angle d'ouverture du cône pour cette situation est $\theta_b = \theta_a - \arcsin(\omega_0 \sin \theta_a/\bar{\omega}_a)$.

Étrangement, Tong et al. n'écrivent pas explicitement la forme de $H^b(t)$ dans leur article, ce qui est pourtant essentiel à la compréhension de la situation. (Notre travail sur ce cas sera le sujet de notre prochaine publication [10].) On voit en fait que le système B est de la même forme que le système A ; une particule de spin 1/2 interagissant avec un champ magnétique effectuant une précession autour d'un axe avec un certain angle d'ouverture et une certaine fréquence. Grâce à cette ressemblance, nous pouvons simplement réécrire les conditions (2.32) et (2.33) en fonction des variables du système B, puisque la dérivation sera exactement la même.

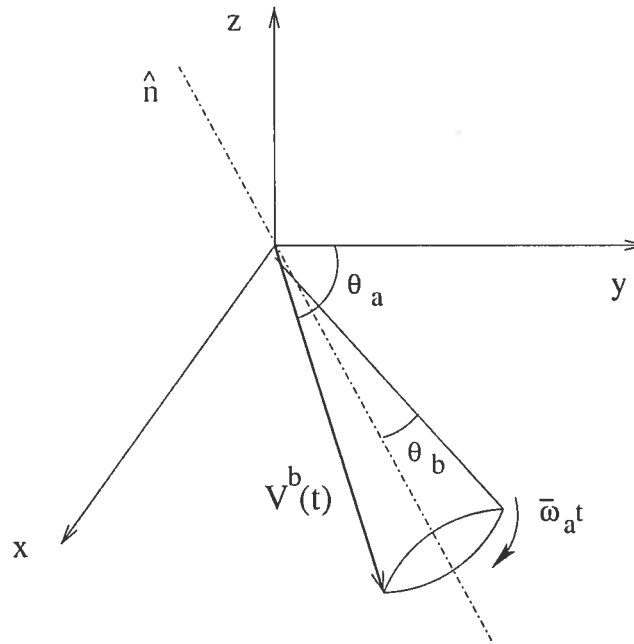


FIG. 2.3 – Évolution de $\vec{V}^b(t)$ dans l'espace. Il décrit un cône autour d'un axe avec un angle d'ouverture différent de $\vec{V}^a(t)$

Afin de comparer les deux systèmes, il est utile de transformer les conditions *a priori* et *a posteriori* du système B en fonctions des variables du système A. On obtient finalement pour la condition *a priori* du système B :

$$\left| \frac{\omega_a \sin \theta_a}{\omega_0} \right| \ll 1, \quad (2.35)$$

ce qui est exactement la même condition que le système A. Il est donc tout à fait normal que lorsque le système A remplit sa condition *a priori*, le système B en fait de même. Cependant, pour la condition *a posteriori* (2.30), nous obtenons :

$$\sin \theta_a \ll 1, \quad (2.36)$$

ce qui est totalement différent que la condition *a posteriori* du système A. Donc, lorsque $\theta_a \simeq \pi/2$ et $\omega_a \ll \omega_0$, la condition *a priori* des deux systèmes est satisfaite. Mais, avec ce choix de paramètres, le système A répond à la condition *a posteriori*

alors que le système B n'y répond pas. C'est ainsi que [14] conclut que la condition standard n'est pas suffisante. Mais, regardons de plus près le comportement des deux systèmes.

Dans la situation décrite au paragraphe précédent, où $\theta_a \simeq \pi/2$ et $\omega_a \ll \omega_0$, le système A évolue adiabatiquement ; la fréquence d'oscillation de l'Hamiltonien est beaucoup plus petite que la fréquence entre les deux différents niveaux d'énergie du système. On s'attend donc à ce que A remplisse les conditions *a priori* et *a posteriori*. En passant aux variables du système B, cette situation se réécrit comme $\omega_b \simeq -\omega_0$ et $\theta_b \ll 1$, et ceci ne correspond pas du tout à une évolution adiabatique. En effet, l'Hamiltonien du système B varie à une fréquence près de la fréquence de résonance entre les deux niveaux d'énergie ; la probabilité de transition est alors très grande. La condition *a priori* est remplie car l'angle d'ouverture θ_b est très petit, ce qui engendre une très faible variation des états. C'est justement de ce cas dont il faut se méfier lorsque l'on utilise le critère standard (2.19), ce qui a été discuté à la fin de la section 2.1 de ce mémoire. Il faut s'assurer que l'Hamiltonien varie lentement avant d'appliquer le critère *a priori*, ce que l'on peut faire en étudiant les différentes échelles de temps et d'énergie en jeu.

C'est exactement le mandat qu'on s'est donné en effectuant le travail reporté dans ce mémoire. Par un développement perturbatif, on écrit l'évolution du système en série. Cette méthode de calcul a l'avantage d'être très intuitive et les résultats s'interprètent facilement. On obtient à l'ordre 0 l'évolution adiabatique du système ; après un temps T , la fonction d'onde du système est dans l'état propre initial ayant évolué dans le temps. Au premier ordre, on permet au système une transition de l'état initial à un autre état, au deuxième ordre, deux transitions et ainsi de suite. On peut déterminer si l'évolution d'un système est adiabatique en vérifiant la convergence de cette série. Si la série converge, cela signifie que les termes d'ordre supérieur sont de plus en plus petits et que l'ordre 0 domine, donc l'approximation peut s'appliquer. La discussion sur la convergence de la série sera pleine de rebondissements, mais ne dévoilons pas la fin immédiatement...

En résumé, dans ce chapitre, nous avons exposé les différentes utilisations du théorème adiabatique. Puisque aucun système n'est parfaitement adiabatique, on doit alors utiliser l'approximation, qui est valide uniquement si l'Hamiltonien évolue suffisamment lentement. La controverse soulevée récemment sur l'incohérence de l'approximation peut être vue comme une erreur d'interprétation sur le domaine de validité. C'est pourquoi on s'efforcera d'explicitier l'importance des échelles d'énergie et de temps dans ce travail.

CHAPITRE 3

LE DÉVELOPPEMENT PERTURBATIF ET LA REPRÉSENTATION EN DIAGRAMME

Le théorème adiabatique stipule qu'un système quantique dont l'Hamiltonien évolue infiniment lentement dans le temps et qui est initialement dans un état propre instantané restera dans cet état à un temps plus tard. Ce chapitre exposera une nouvelle méthode de calcul de la fonction d'onde d'un système, qui est particulièrement utile lorsque le système évolue lentement. Cette méthode est très intuitive car elle permet, par un développement perturbatif, d'écrire l'état du système en série de puissances. Ainsi, chaque terme de la série correspond à une séquence d'évolutions adiabatiques durant lesquelles le système demeure dans un état propre instantané de l'Hamiltonien, ponctuée de transitions d'un état à l'autre. Le premier terme de la série est donc l'évolution adiabatique standard, et les termes suivants sont les corrections aux différents ordres. Cette méthode permet également une représentation par diagramme de l'évolution, ce qui facilite l'écriture de la probabilité de présence du système dans un certain état. Cependant, pour pouvoir être utilisée, la série qui en résulte doit converger. Suivra alors une discussion sur la grandeur des amplitudes aux ordres supérieurs. Le raisonnement suivi ici est celui d'un article qu'ont écrit R. MacKenzie, E. Marcotte et H. Paquette [11].

3.1 Le développement perturbatif

On considère un Hamiltonien dépendant du temps $H(t)$. Les états propres instantanés $|n(t)\rangle$ et les énergies propres instantanées $E_n(t)$ de l'Hamiltonien sont les solutions à l'équation de Schrödinger (1.1) :

$$H(t) |n(t)\rangle = E_n(t) |n(t)\rangle. \quad (3.1)$$

Nous supposons que l'état initial est non-dégénéré et ce pour tout le temps de l'évolution. Nous ne supposons pas que l'Hamiltonien varie lentement ; le but de notre démarche est plutôt de trouver dans quelle limite l'approximation adiabatique s'applique.

Prenons comme état initial $|\psi(0)\rangle = |0(0)\rangle$. On fait évoluer l'état propre dans le temps à l'aide de l'opérateur d'évolution

$$U(T) = \hat{T} e^{-i \int_0^T dt H(t)}, \quad (3.2)$$

où \hat{T} est l'opérateur d'ordination du temps. De cette manière,

$$|\psi(T)\rangle = U(T) |0(0)\rangle. \quad (3.3)$$

Nous allons maintenant diviser l'évolution en tranches infinitésimales de temps. Dans chacune de ces tranches, il sera possible de calculer l'évolution d'une manière perturbative. Pour ce faire, nous divisons donc le temps total T en N intervalles d'une durée $\epsilon = T/N$; nous prendrons à la fin la limite $N \rightarrow \infty$, $\epsilon \rightarrow 0$ avec T fixe. On définit $t_j = j\epsilon$, le temps au début du j ième intervalle. On peut alors décomposer l'opérateur d'évolution en N tranches de temps

$$U(T) = U_{N-1} U_{N-2} \cdots U_1 U_0, \quad (3.4)$$

où U_j est l'opérateur qui fait évoluer le système du temps t_j au temps t_{j+1} :

$$U_j = \hat{T} e^{-i \int_{t_j}^{t_{j+1}} dt H(t)}. \quad (3.5)$$

Trouvons d'abord l'état du système après la première tranche de temps ; il sera ensuite facile de généraliser pour les N tranches.

Au temps t_1 , l'état du système est $|\psi(t_1)\rangle = U_0 |\psi(0)\rangle = U_0 |0(0)\rangle$. Il est utile

de développer cet état en fonction des états propres de $H(t_1)$:

$$\begin{aligned} |\psi(t_1)\rangle &= \sum_m |m(t_1)\rangle \langle m(t_1)| U_0 |0(0)\rangle \\ &= \sum_m |m(t_1)\rangle \langle m(t_1)| \hat{T} e^{-i \int_0^{t_1} dt H(t)} |0(0)\rangle. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Il est à noter que jusqu'à présent, nous n'avons fait aucune approximation. C'est maintenant ce que nous allons faire. On peut écrire l'Hamiltonien comme $H(t) = \sum_n |n(t)\rangle E_n(t) \langle n(t)|$, et on développe chacun de ces termes autour de $t = 0$:

$$\begin{aligned} |n(t)\rangle &= |n(0)\rangle + t |\dot{n}(0)\rangle + \dots \\ E_n(t) &= E_n(0) + t \dot{E}_n(0) + \dots \\ \langle n(t)| &= \langle n(0)| + t \langle \dot{n}(0)| + \dots \end{aligned} \quad (3.7)$$

Puisque nous sommes intéressés par des temps plus petits que ϵ , qui tendra éventuellement vers zéro, les séries convergent pour ϵ suffisamment petit tant que les dérivées sont finies. Alors,

$$\begin{aligned} H(t) &= \sum_n \left\{ |n(0)\rangle E_n(0) \langle n(0)| + t \left(|n(0)\rangle E_n(0) \langle \dot{n}(0)| \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + |\dot{n}(0)\rangle \dot{E}_n(0) \langle n(0)| + |\dot{n}(0)\rangle E_n(0) \langle n(0)| \right) + O(t^2) \right\} \end{aligned} \quad (3.8)$$

En fait, nous allons voir sous peu que seulement le premier terme est nécessaire.

On peut maintenant écrire une approximation pour le terme U_0 de l'équation (3.6) :

$$\begin{aligned} U_0 &= 1 - i \int_0^\epsilon dt H(t) + O(\epsilon^2) \\ &= 1 - i\epsilon \sum_n |n(0)\rangle E_n(0) \langle n(0)| + O(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Notons que les termes du premier ordre en t dans l'équation (3.8) deviennent des

termes d'ordre ϵ^2 dans (3.9). Nous pouvons donc les négliger.

Nous développons aussi $\langle m(t_1) |$:

$$\langle m(t_1) | = \langle m(0) | + \epsilon \langle \dot{m}(0) | + O(\epsilon^2). \quad (3.10)$$

Et on peut alors écrire l'élément de matrice de (3.6) comme

$$\begin{aligned} \langle m(t_1) | U_0 | 0(0) \rangle &= (\langle m(0) | + \epsilon \langle \dot{m}(0) |) \left(1 - i\epsilon \sum_n |n(0)\rangle E_n(0) \langle n(0)| \right) | 0(0) \rangle \\ &\quad + O(\epsilon^2) \\ &= \delta_{m0} - i\epsilon E_m(0) \delta_{m0} + \epsilon \langle \dot{m}(0) | 0(0) \rangle + O(\epsilon^2) \\ &= e^{-i\epsilon E_m(0)} \delta_{m0} + \epsilon \langle \dot{m}(0) | 0(0) \rangle + O(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (3.11)$$

En substituant ceci dans (3.6), on obtient

$$|\psi(t_1)\rangle = e^{-i\epsilon E_0(0)} |0(t_1)\rangle + \epsilon \sum_m \langle \dot{m}(0) | 0(0) \rangle |m(t_1)\rangle + O(\epsilon^2). \quad (3.12)$$

À ce point, nous pouvons définir la phase des états propres de la manière qui nous plaît ; nous utilisons cette liberté pour poser $\langle \dot{n}(t) | n(t) \rangle = 0$ pour tout n .¹ Avec ce choix, la somme sur m dans (3.12) n'inclut pas $m = 0$.

Nous avons donc réussi à écrire $|\psi(t_1)\rangle$ en terme des états propres instantanés de $H(t_1)$, les coefficients étant de différents ordres en ϵ . Le terme dominant est $|0(t_1)\rangle$ puisque nous n'avons pas laissé assez de temps au système pour pouvoir changer d'état.

Nous pouvons appliquer cette méthode au prochain intervalle, et ainsi de suite

¹Localement, cela est valide. Voir la discussion sur la phase de Berry à la section 2.1

jusqu'à l'intervalle N . Nous obtenons alors l'expression suivante :

$$|\psi(T)\rangle = \sum_{m_N} \sum_{m_{N-1}} \cdots \sum_{m_2} \sum_{m_1} |m_N(T)\rangle \prod_{j=0}^{N-1} \left(\delta_{m_{j+1}, m_j} e^{-i\epsilon E_{m_j}(t_j)} + \epsilon \langle \dot{m}_{j+1}(t_j) | m_j(t_j) \rangle + O(\epsilon^2) \right), \quad (3.13)$$

où m_0 n'est pas inclus dans la somme puisque $m_0 = 0$. Lorsque ϵ est petit, le premier terme de chaque facteur entre parenthèses domine. Cependant, les produits contenant des ϵ ne sont pas nécessairement négligeables lorsque $\epsilon \rightarrow 0$, car le passage des sommes aux intégrales nécessite un paramètre infinitésimal. Toutefois, nous démontrerons que le terme en ϵ^2 est négligeable.

Nous allons maintenant séparer les différents termes de $|\psi(T)\rangle$ selon leur ordre en ϵ . Le premier terme n'a pas de facteur ϵ et il provient de la multiplication de tous les termes dominants de (3.13). On obtient alors ce que nous appellerons $|\psi(T)\rangle^{(0)}$:

$$|\psi(T)\rangle^{(0)} = \sum_{m_N} \sum_{m_{N-1}} \cdots \sum_{m_2} \sum_{m_1} |m_N(T)\rangle \prod_{j=0}^{N-1} \delta_{m_{j+1}, m_j} e^{-i\epsilon E_{m_j}(t_j)}. \quad (3.14)$$

Les fonctions δ éliminent toutes les sommes, et en prenant la limite $N \rightarrow \infty$ on obtient

$$|\psi(T)\rangle^{(0)} = e^{-i \int_0^T dt E_0(t)} |0(T)\rangle. \quad (3.15)$$

C'est l'évolution adiabatique du système ! L'état final est l'état propre initial qui a évolué jusqu'au temps T , multiplié par la phase dynamique.

La prochaine contribution à $|\psi(T)\rangle$, que nous appellerons $|\psi(T)\rangle^{(1)}$, est obtenue en multipliant un terme $\epsilon \langle \dot{m}_{k+1} | m_k \rangle$ avec les $N-1$ termes dominants du produit de (3.13). Nous devons sommer sur tous les k états possibles du facteur $\epsilon \langle \dot{m}_{k+1} | m_k \rangle$:

$$|\psi(T)\rangle^{(1)} = \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{m_N} \sum_{m_{N-1}} \cdots \sum_{m_2} \sum_{m_1} |m_N(T)\rangle \left(\prod_{j \neq k} \delta_{m_{j+1}, m_j} e^{-i\epsilon E_{m_j}(t_j)} \right) \epsilon \langle \dot{m}_{k+1}(t_k) | m_k(t_k) \rangle. \quad (3.16)$$

La seule somme restante est celle sur m_{k+1} ; les m_k précédents sont mis à zéro alors que les suivants sont mis à m_{k+1} . Renommant $m_{k+1} \rightarrow m$ et $t_k \rightarrow t_1$ et en prenant la limite $N \rightarrow \infty$, nous obtenons

$$|\psi(T)\rangle^{(1)} = \sum_{m \neq 0} |m(T)\rangle \int_0^T dt_1 e^{-i \int_{t_1}^T dt E_m(t)} \langle \dot{m}(t_1) | 0(t_1) \rangle e^{-i \int_0^{t_1} dt E_0(t)}. \quad (3.17)$$

Cette contribution représente l'état initial ayant évolué jusqu'au temps t_1 (avec sa phase dynamique), une transition de l'état propre $0 \rightarrow m$ à ce temps, suivi d'une autre évolution adiabatique dans l'état $|m\rangle$. On peut donc interpréter $|\psi(T)\rangle^{(1)}$ comme la contribution à $|\psi(T)\rangle$ représentant une seule transition (d'où l'indice supérieur).

La prochaine contribution à $|\psi(T)\rangle$, en prenant deux termes $\epsilon \langle \dot{m}_{k+1} | m_k \rangle$ dans le produit de (3.13), est celle à deux transitions ; le résultat peut être écrit par déduction :

$$|\psi(T)\rangle^{(2)} = \sum_{m \neq n} \sum_{n \neq 0} |m(T)\rangle \int_0^T dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 e^{-i \int_{t_2}^T dt E_m(t)} \langle \dot{m}(t_2) | n(t_2) \rangle e^{-i \int_{t_1}^{t_2} dt E_n(t)} \langle \dot{n}(t_1) | 0(t_1) \rangle e^{-i \int_0^{t_1} dt E_0(t)}. \quad (3.18)$$

Nous interprétons cette contribution comme une évolution adiabatique du système, sauf aux temps t_1 et $t_2 > t_1$ où il y a une transition. La généralisation aux contributions d'ordres supérieurs est immédiate.

Il reste à démontrer que le terme $O(\epsilon^2)$ dans (3.13) est négligeable. Si, dans le produit, on prend un terme $O(\epsilon^2)$ et qu'autrement on prend les termes dominants, on obtient une équation de la forme :

$$\epsilon^2 \sum_k \sum_m |m(T)\rangle \exp \left(-i\epsilon \sum_{j=k+1}^{N-1} E_m(t_j) \right) X_k \exp \left(-i\epsilon \sum_{j=0}^{k-1} E_0(t_j) \right), \quad (3.19)$$

où les X_k contiennent différents éléments de matrices, énergies, etc. Nous pouvons convertir $\epsilon \sum_k$ et $\epsilon \sum_j$ en intégrales, laissant un facteur ϵ car la somme sur m doit

rester. Ceci démontre que ce genre de terme tend vers zéro lorsque $\epsilon \rightarrow 0$, et est par conséquent négligeable.

3.2 La représentation en diagramme

En rassemblant tous les termes que nous avons calculés, on obtient un développement perturbatif de $|\psi(T)\rangle$:

$$|\psi(T)\rangle = |\psi(T)\rangle^{(0)} + |\psi(T)\rangle^{(1)} + |\psi(T)\rangle^{(2)} + \dots \quad (3.20)$$

Nous avons vu que chacun de ces termes pouvait être interprété selon le nombre de transitions qu'il permettait. On peut donc associer un diagramme à chaque terme de la série représentant son évolution dans le temps. Avec le temps croissant vers la droite,

$$|\psi(T)\rangle = \text{—} \underset{0}{\text{—}} \text{—} + \text{—} \underset{0}{\text{—}} \overset{m}{\text{—}}_{t_1} + \text{—} \underset{0}{\text{—}} \overset{n}{\text{—}}_{t_1} \overset{m}{\text{—}}_{t_2} + \dots, \quad (3.21)$$

où chaque ligne horizontale représente un facteur $\exp -i \int dt E_n(t)$, chaque transition $n \rightarrow m$ représente un facteur $\langle m(t) | n(t) \rangle$, et on doit ajouter un ket correspondant à l'état final au temps T ($|0(T)\rangle$ pour le premier diagramme, $|m(T)\rangle$ pour les autres). Finalement, nous devons intégrer sur les temps de transitions (en respectant la chronologie) et sommer sur les états m, n , etc.

Avec cette représentation, il devient facile de calculer l'amplitude de probabilité de finir dans l'état $|m(T)\rangle$, $\langle m(T) | \psi(T) \rangle$. Pour ce faire, on utilise le développement par diagramme, mais on ne somme pas sur les états finaux et on n'ajoute pas le ket final dans l'expression analytique. Par exemple, l'amplitude de finir dans l'état

initial $|0(T)\rangle$ (donc, de n'avoir fait aucun saut net) est

$$\begin{aligned}
 \langle 0(T) | \psi(T) \rangle &= \text{---} \underset{t_1}{\overset{0}{\text{---}}} \text{---} + \text{---} \underset{t_1}{\overset{n}{\text{---}}} \underset{t_2}{\text{---}} \text{---} + \dots \\
 &= e^{-i \int_0^T dt E_0(t)} \left\{ 1 + \sum_{n \neq 0} \int_0^T dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \langle \dot{0}(t_2) | n(t_2) \rangle \right. \\
 &\quad \left. \times e^{-i \int_{t_1}^{t_2} dt (E_n(t) - E_0(t))} \langle \dot{n}(t_1) | 0(t_1) \rangle + \dots \right\}, \quad (3.22)
 \end{aligned}$$

alors que l'amplitude d'avoir sauté à l'état $|m(T)\rangle$ est

$$\begin{aligned}
 \langle m(T) | \psi(T) \rangle &= \text{---} \underset{t_1}{\overset{m}{\text{---}}} \text{---} + \text{---} \underset{t_1}{\overset{n}{\text{---}}} \underset{t_2}{\text{---}} \underset{m}{\text{---}} \text{---} + \dots \\
 &= e^{-i \int_0^T dt E_0(t)} \left\{ \int_0^T dt_1 e^{-i \int_{t_1}^T dt (E_m(t) - E_0(t))} \langle \dot{m}(t_1) | 0(t_1) \rangle \right. \\
 &\quad + \sum_{n \neq 0, m} \int_0^T dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 e^{-i \int_{t_2}^T dt (E_m(t) - E_0(t))} \langle \dot{n}(t_2) | n(t_2) \rangle \\
 &\quad \left. \times e^{-i \int_{t_1}^{t_2} dt (E_n(t) - E_0(t))} \langle \dot{n}(t_1) | 0(t_1) \rangle + \dots \right\} \quad (3.23)
 \end{aligned}$$

3.3 La convergence du développement

Le développement (3.20) de $|\psi(T)\rangle$ est un développement en puissance du nombre de transitions que le système subit. Nous nous intéressons maintenant aux caractéristiques que le système doit présenter afin que cette série converge. Ce développement est vrai pour tout système, cependant, pour pouvoir l'utiliser, il doit converger. Intuitivement, on s'attend à ce que la série converge lorsque l'Hamiltonien varie lentement car les transitions sont plus rares. L'augmentation en puissance des éléments de matrices $\langle \dot{n} | n \rangle$ dans les équations (3.15, 3.17, 3.18) suggère que lorsque la variation dans le temps de l'Hamiltonien diminue, la variation des états propres instantanés diminue également, et donc la série devient de plus en plus convergente. Cependant, le fait que les éléments de matrices dans (3.23) soient petits peut être compensé par la largeur de l'intervalle sur lequel le

temps est intégré.

C'est en fait la relativement lente variation des éléments de matrices par rapport à leur fréquence de Bohr ($E_m - E_n$) qui est le critère accepté pour la convergence de (3.20), et donc de la validité de l'approximation adiabatique, comme nous l'avons vu à l'équation (2.19) et comme nous le verrons dans ce chapitre en analysant la grandeur de la première correction.

Avant d'analyser le cas d'une évolution adiabatique, regardons d'abord le cas non-adiabatique. Une observation très intuitive est que pour un certain Hamiltonien $H(t)$ et pour un temps total d'évolution T suffisamment petit, les intégrales comme dans les équations (3.17,3.18) tendent vers zéro et le système est, en bonne approximation, dans son état initial car on ne lui a pas laissé assez de temps pour effectuer une transition. Mais cette observation est très vague sur la valeur nécessaire de T pour en être ainsi. Si l'échelle caractéristique de temps sur lequel l'Hamiltonien varie est τ , alors génériquement $|\langle \dot{m} | n \rangle| \sim (\tau)^{-1}$, et une analyse dimensionnelle indique que $\| |\psi(t)\rangle^{(k)} \| \sim (T/\tau)^k$. Donc, les termes successifs dans (3.20) sont décroissants si $T < \tau$, et la série convergera. Ceci est un critère intuitif, une analyse plus approfondie de la convergence est nécessaire et sera abordée dans le prochain chapitre de ce mémoire. Dans ce cadre, on peut toutefois conclure que l'état initial sera dépeuplé sur une échelle de temps $T \sim \tau$, ce à quoi l'on s'attendait : l'échelle de temps du dépeuplement de l'état initial est le temps caractéristique de variation de l'Hamiltonien.

Jusqu'à maintenant, nous n'avons pas utilisé l'autre échelle de temps impliqué dans l'approximation adiabatique : l'inverse de l'échelle caractéristique d'énergie. Pour bien déterminer la validité de l'approximation, il est important de considérer les trois échelles de temps disponibles, c'est-à-dire l'inverse de l'échelle caractéristique d'énergie E , le taux de variation de l'Hamiltonien τ , et la durée de l'évolution T . Il est commun de considérer les deux dernières échelles comme étant égales, mais pour conserver la généralité, nous les considérerons indépendantes.

Nous allons faire un changement de notation pour utiliser des variables sans

dimensions. Ainsi, il sera plus facile de comparer la grandeur relative de chacun des différents termes. L'Hamiltonien est caractérisé par une échelle de temps d'évolution τ et une échelle d'énergie E . On définit donc un temps sans dimension $s = t/\tau$, et l'Hamiltonien sans dimension ainsi que ses états et valeurs propres dépendent d'une manière lisse de s ; $h(s) = H(t)/E$, $\epsilon_n(s) = E_n(s)/E$ and $|\hat{n}(s)\rangle = |n(t)\rangle$. Nous posons aussi que :

1. L'état $|\hat{0}(s)\rangle$ est d'énergie zéro, $\epsilon_0(s) = 0$. (Ceci est posé pour simplifier les calculs, on peut facilement le modifier.)
2. Le saut d'énergie entre le niveau initial et les autres niveaux est au minimum l'unité; $|\epsilon_n(s)| \geq 1 \forall n \neq 0$.
3. De plus, $h(s)$ est "générique" : les dérivées de l'énergie $\epsilon_n(s)$ sont de l'ordre de 1 (pour $n \neq 0$), et les dérivées des états $|\hat{n}(s)\rangle$ ont une norme de l'ordre de 1. (Ceci est la supposition que $H(t)$ est caractérisé par une échelle de temps τ , reformulé en terme des variables sans dimensions)

La durée du processus est T , on définit alors une durée sans dimension $S = T/\tau$. On définit aussi un paramètre $\lambda = E\tau$. L'Hamiltonien évolue lentement lorsque $\lambda \gg 1$, et on espère alors avoir une évolution adiabatique du système. On définit finalement un paramètre $\gamma = \max_{s; m \neq 0} |\langle \hat{m}'(s) | \hat{0}(s) \rangle|$, où l'apostrophe symbolise la dérivée par rapport à l'argument; γ est de l'ordre de 1.

Nous pouvons maintenant écrire le développement (3.20) en terme des quantités sans dimensions. La première correction (3.17) devient alors

$$|\hat{\psi}(S)\rangle^{(1)} = \sum_{m \neq 0} |\hat{m}(S)\rangle \int_0^S ds_1 e^{-i\lambda \int_{s_1}^S ds \epsilon_m(s)} \langle \hat{m}'(s_1) | \hat{0}(s_1) \rangle. \quad (3.24)$$

Puisque le terme d'ordre zéro $|\hat{\psi}(S)\rangle^{(0)}$ a une norme de 1, la première indication de la convergence de la série, et de la validité du théorème adiabatique, nous provient

de la norme au carré de la correction au premier ordre :

$${}^{(1)}\langle\hat{\psi}(S)|\hat{\psi}(S)\rangle^{(1)} = \sum_{m \neq 0} |A_m^{(1)}(S)|^2, \quad (3.25)$$

où

$$A_m^{(1)}(S) = \langle\hat{m}(S)|\hat{\psi}(S)\rangle^{(1)} = \int_0^S ds_1 e^{-i\lambda \int_{s_1}^S ds \epsilon_m(s)} \langle\hat{m}'(s_1)|\hat{0}(s_1)\rangle. \quad (3.26)$$

Notons que le fait que $|A_m^{(1)}|$ soit petit n'est pas dû au fait que l'élément de matrice (qui est de l'ordre de un) soit petit. Pour voir que $|A_m^{(1)}|$ tend vers zéro dans la limite $\lambda \rightarrow \infty$, on note que puisque ϵ_m et ses dérivées sont de l'ordre de 1, l'exponentielle oscille rapidement sur une échelle de temps (sans dimension) $(\lambda)^{-1}$. L'élément de matrice, au contraire, varie sur une échelle de temps 1, donc dans une période de l'exponentielle, l'élément de matrice est approximativement constant, et l'intégrale de l'exponentielle donne 0. Les corrections de cette approximation donnent un résultat de l'ordre de $1/\lambda$.

Par exemple, si $\epsilon_m(s)$ et l'élément de matrice sont constants, on peut les poser égaux à 1. Alors

$$|A_m^{(1)}| = \frac{|1 - e^{-i\lambda S}|}{\lambda}, \quad (3.27)$$

qui tend clairement vers zéro lorsque $\lambda \rightarrow \infty$.

Pour analyser $A_m^{(1)}$ dans le cas général, on définit $f_m(s) = \int_0^s ds' \epsilon_m(s')$ et $g_m(s) = \langle\hat{m}'(s)|\hat{0}(s)\rangle$. Alors

$$A_m^{(1)} = e^{-i\lambda f_m(S)} \int_0^S ds e^{i\lambda f_m(s)} g_m(s). \quad (3.28)$$

La manière dont nous avons posé les grandeurs des différentes quantités au départ implique que f_m , g_m et leur dérivées sont de l'ordre de 1, et que $|f'_m| \geq 1$. En réécrivant l'exponentielle à l'intérieur de l'intégrale de la dernière équation comme

$$e^{i\lambda f_m(s)} = \frac{1}{i\lambda \epsilon_m(s)} \frac{d}{ds} (e^{i\lambda f_m(s)}), \quad (3.29)$$

et en dérivant par partie l'équation (3.28), on obtient :

$$A_m^{(1)} = \frac{1}{i\lambda} \left(\frac{g_m(S)}{\epsilon_m(S)} - e^{-i\lambda f_m(S)} \frac{g_m(0)}{\epsilon_m(0)} - e^{-i\lambda f_m(S)} \int_0^S ds e^{i\lambda f_m(s)} \frac{d}{ds} \frac{g_m(s)}{\epsilon_m(s)} \right). \quad (3.30)$$

Si $S \sim 1$ et $\lambda \gg 1$, on peut négliger le dernier terme en suivant le même raisonnement élaboré après l'équation (3.26) ;

$$A_m^{(1)} = \frac{1}{i\lambda} \left(\frac{g_m(S)}{\epsilon_m(S)} - e^{-i\lambda f_m(S)} \frac{g_m(0)}{\epsilon_m(0)} \right) + O(\lambda^{-2}). \quad (3.31)$$

Ceci démontre clairement que la contribution dominante pour $|A_m^{(1)}|$ est le premier terme quand $\lambda \gg 1$. On peut réécrire cette expression en terme des quantités avec dimensions :

$$A_m^{(1)} = \frac{\langle \dot{m}(T) | 0(T) \rangle}{iE_m(T)} - e^{-i \int_0^T dt E_m(t)} \frac{\langle \dot{m}(0) | 0(0) \rangle}{iE_m(0)} + O((ET)^{-2}). \quad (3.32)$$

On s'aperçoit que le terme dominant dépend seulement des valeurs initiales et finales de l'élément de matrices ; en particulier, dans le cas où les états propres instantanés initiaux et finaux sont constants, le terme de corrections est nul et l'approximation adiabatique est plus juste, étant valide jusqu'à un facteur $1/(ET)^2$ au lieu de $1/(ET)$.

Supposant que ce cas particulier ne s'applique pas au système que nous étudions, nous pouvons maintenant donner une limite à $|A_m^{(1)}|$ en terme des quantités définies plus tôt. Les éléments de matrices satisfont $|g_m| \geq \gamma$, alors que les énergies sans dimension ϵ_m sont d'au moins l'unité. Alors

$$|A_m^{(1)}| \leq \frac{2\gamma}{\lambda} = \frac{2 \max |\langle \dot{m}(t) | 0(t) \rangle|}{E}. \quad (3.33)$$

Nous pouvons donc conclure que, à la lumière de cette analyse au premier ordre, l'approximation adiabatique est valide si le côté droit de l'équation (3.33) est petit ; c'est essentiellement la condition standard pour la validité de l'approximation adiabatique qui a été réexaminée récemment [5, 8, 12–14]. Mais, est-ce que cette analyse

au premier ordre peut être généralisée aux ordres supérieurs, c'est-à dire est-ce que $|A_n^{(k)}| \sim (E\tau)^{-k}$? Malheureusement, nous ne pouvons affirmer cela, comme nous allons le voir sous peu. En fait, cela n'est pas surprenant car si cela aurait été le cas, nous aurions pu conclure que l'Hamiltonien évoluant lentement ne donne *jamais* lieu à des transitions avec une probabilité appréciable. Cependant, on s'attend intuitivement que si on laisse une période très grande à l'Hamiltonien pour évoluer, il y aura une transition tôt ou tard. Pour une certaine variation de l'Hamiltonien, le système doit éventuellement sortir de l'état instantané lié à l'état initial.

Nous pouvons constater que l'analyse au premier ordre ne s'étend pas aux ordres supérieurs facilement en analysant $A_0^{(2)}$, le second terme de l'équation (3.22). Nous pouvons écrire cette équation sous la forme sans dimension suivante :

$$A_0^{(2)}(S) = \sum_n \int_0^S ds_2 \langle \hat{0}'(s_2) | \hat{n}(s_2) \rangle A_n^{(1)}(s_2). \quad (3.34)$$

De (3.31), on voit que $A_n^{(1)}$ contient un terme non-oscillant, et que l'argument utilisé pour démontrer que (3.26) est petit ne s'applique plus dans (3.34) ; or,

$$A_0^{(2)}(S) \sim \frac{S}{\lambda} = \frac{T}{\tau} \frac{1}{E\tau}. \quad (3.35)$$

plutôt que d'être d'un facteur $(E\tau)^{-1}$ fois le terme du premier ordre, c'est un facteur de l'ordre de T/τ fois le terme du premier ordre. En considérant ces valeurs au premier degré, nous concluons que la série ne converge pas, et que l'état initial est dépeuplé sur une échelle de temps $T \sim \tau$: cette situation ressemblerait au cas d'une évolution non-adiabatique. Pourtant, ce n'est pas le cas ; on démontrera au chapitre suivant que les termes d'ordres supérieurs décroissent jusqu'à un temps de l'ordre $T \sim E\tau^2$. Ainsi, l'échelle de temps de dépeuplement est plus longue que le cas non-adiabatique par un facteur $E\tau \gg 1$ (l'inégalité étant vraie pour un Hamiltonien évoluant lentement). Dans le cas adiabatique, le système reste donc dans l'état initial plus longtemps. Ceci sera analysé en détail dans la suite de ce mémoire.

Pour faire le lien avec le travail de Tong et al. discuté en introduction, le système $H_b(t)$ ne suit pas les conditions que nous avons énumérées dans ce chapitre, c'est-à-dire que l'Hamiltonien ne peut être réécrit comme $H(t) = Eh(t/\tau)$, où $h(s)$ est "générique". En effet, les dérivées des états n'ont pas une norme de l'ordre de 1, mais tendent vers 0. Un Hamiltonien contenant une partie oscillant rapidement mais petite en amplitude peut satisfaire la condition adiabatique standard (2.19), mais son évolution n'est pas adiabatique pour autant.

CHAPITRE 4

LE CALCUL DE L'ERREUR SUR L'APPROXIMATION ADIABATIQUE PAR RÉCURRENCE

Notre manière d'écrire les différents ordres de l'approximation adiabatique nous permet de voir la récurrence des termes. Comme nous l'avons vu au chapitre précédent, l'amplitude à un certain ordre de se trouver dans un état m dépend de l'amplitude de tous les états à l'ordre précédent. Nous déduirons la forme générale de l'amplitude : ce sera une sommation sur les états possibles d'une matrice X à trois indices (l'ordre, l'indice de sommation et l'état final) multiplié par une phase et divisé par λ à la puissance de l'ordre. Le paramètre sans dimension λ est notre indicateur pour la dominance des termes, $\lambda = E\tau \gg 1$ dans le cas adiabatique. On isolera X et on pourra ainsi déduire l'ordre de grandeur des termes dominants dans l'amplitude. Le résultat est assez intéressant : on s'apercevra que l'amplitude diminue d'un facteur $1/\lambda$ à chaque ordre impair et augmente d'un facteur S à chaque ordre pair. On conclut donc que la série converge si $S \ll \lambda$, ce qui implique comme prévu que le temps d'évolution S est un paramètre de première importance pour la validité de l'approximation adiabatique ! Cela implique également qu'un système évoluant lentement gagne un facteur $E\tau$ dans son temps de dépeuplement par rapport à un système non-adiabatique. Ce chapitre fait un survol rapide du calcul, le lecteur intéressé aux détails devra consulter le mémoire de J. Pinel [9].

4.1 La forme générale de l'amplitude

Nous voulons premièrement comprendre la structure générale de l'amplitude. Nous savons, par la représentation par diagramme, qu'elle dépend de l'amplitude à l'ordre précédent. Nous nous servirons de cette propriété pour extraire l'information afin de pouvoir la réexprimer en fonction d'une matrice. Tout d'abord, nous allons calculer l'amplitude à l'ordre 0 et 1, et nous pourrons par la suite déduire sa forme

générale.

On peut facilement trouver l'amplitude que le système soit dans l'état m différent de l'état initial au temps S à l'ordre 0 à l'aide de l'équation (3.15),

$$\begin{aligned} A_m^{(0)}(S) = \langle \hat{m}(S) | \hat{\psi}(S) \rangle^{(0)} &= e^{-i\lambda \int_0^S ds \epsilon_0(s)} \langle \hat{m}'(S) | \hat{0}(S) \rangle \\ &= \delta_{m0} e^{-i\lambda f_0(S)}. \end{aligned} \quad (4.1)$$

où les fonctions f ont été définies au dernier chapitre.

Comme nous l'avons vu au chapitre 3 (3.26) :

$$\begin{aligned} A_m^{(1)}(S) &= \langle \hat{m}(S) | \hat{\psi}(S) \rangle^{(1)} = \int_0^S ds_1 e^{-i\lambda \int_{s_1}^S ds \epsilon_m(s)} \langle \hat{m}'(s_1) | \hat{0}(s_1) \rangle e^{-i\lambda \int_0^{s_1} ds \epsilon_0(s)} \\ &= e^{-i\lambda f_m(S)} \int_0^S ds_1 e^{i\lambda f_m(s_1)} \langle \hat{m}'(s_1) | \hat{0}(s_1) \rangle e^{-i\lambda f_0(s_1)}. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Si nous effectuons l'intégrale de la même manière que l'intégrale (3.28), on obtient :

$$A_m^{(1)}(S) = \frac{1}{i\lambda} \left(e^{-i\lambda f_0(S)} \frac{g_m(S)}{\epsilon_m(S) - \epsilon_0(S)} - e^{-i\lambda f_m(S)} \frac{g_m(0)}{\epsilon_m(0) - \epsilon_0(S)} \right) + O(\lambda^{-2}), \quad (4.3)$$

où $m \neq 0$.

Nous voulons généraliser la forme des amplitudes à tous les ordres. Nous savons que cela est possible par la représentation par diagramme des amplitudes. En effet, l'amplitude à un certain ordre dépend directement de l'amplitude à l'ordre précédent :

$$A_n^{(1)} \sim \begin{array}{c} \text{---} 0 \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} n \text{---} \\ \uparrow \\ t_1 \end{array} \quad (4.4)$$

$$A_m^{(2)} \sim \begin{array}{c} \text{---} 0 \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} n \text{---} \\ \uparrow \\ t_1 \end{array} \begin{array}{c} \text{---} m \text{---} \\ \uparrow \\ t_2 \end{array} \quad (4.5)$$

Nous pouvons alors déduire que la forme de $A_m^{(k)}(S)$ est une sommation sur toutes les amplitudes possibles à l'ordre inférieure, et on doit ajouter la transition

supplémentaire :

$$A_m^{(k)}(S) = \sum_{n \neq m} e^{-i\lambda f_m(S)} \int_0^S ds_k e^{i\lambda f_m(s_k)} \langle \hat{n}'(s_k) | \hat{n}(s_k) \rangle A_n^{(k-1)}(s_k). \quad (4.6)$$

En fait, on remarque que chacun des termes de $A_m^{(k)}(S)$ peut s'écrire comme une somme d'exponentielles de la forme $e^{-i\lambda f_p(S)}$, où p couvre tout le spectre, un facteur $1/(i\lambda)^k$ qui est notre indicateur de dominance des termes, le tout multiplié par un facteur qui peut être considéré comme une fonction évoluant lentement dans le temps. Ici, on peut le voir explicitement avec l'expression (4.3). Les lecteurs voulant voir les amplitudes explicites d'ordre 2 et 3 peuvent les retrouver dans [9]. Alors, nous arrivons à la forme générale des amplitudes à tous les ordres :

$$A_m^{(k)}(S) = \sum_p \frac{e^{-i\lambda f_p(S)}}{(i\lambda)^k} X_{pm}^k(S). \quad (4.7)$$

où $X_{pm}^k(S)$ est le facteur regroupant toutes les fonctions évoluant lentement dans le temps. $A_m^{(k)}(S)$ est donc la somme de phases rapides multipliées par des fonctions lisses. Afin de pouvoir prédire l'ordre de grandeur de cette expression aux différents ordres, nous tenterons d'établir la récurrence des amplitudes, plus précisément de la matrice X .

4.2 La récurrence de la matrice X

On cherche maintenant la forme de $X_{pm}^k(S)$ par récurrence. Ce changement a l'avantage d'éliminer les phases : nous comparerons seulement les fonctions lisses, qui portent l'ordre de grandeur de $A_m^{(k)}(S)$. Nous allons donc remplacer $A_m^{(k)}$ et

$A_m^{(k-1)}$ de l'équation (4.6) par leur forme dictée par l'équation (4.7) :

$$\sum_p \frac{e^{-i\lambda f_p(S)}}{(i\lambda)^k} X_{pm}^k(S) = \sum_{n \neq m} e^{-i\lambda f_m(S)} \int_0^S ds_k e^{i\lambda f_m(s_k)} \langle \hat{m}'(s_k) | \hat{n}(s_k) \rangle \sum_q \frac{e^{-i\lambda f_q(s_k)}}{(i\lambda)^{k-1}} X_{qn}^{k-1}(s_k) \quad (4.8)$$

$$= \sum_{n \neq m} \sum_q \frac{e^{-i\lambda f_m(S)}}{(i\lambda)^{k-1}} \int_0^S ds_k e^{i\lambda(f_m(s_k) - f_q(s_k))} \langle \hat{m}'(s_k) | \hat{n}(s_k) \rangle X_{qn}^{k-1}(s_k). \quad (4.9)$$

On sépare également les cas $q = m$ et $q \neq m$. Pour le cas où $q \neq m$, on intègre par partie comme nous l'avons fait à l'équation (4.3). Nous obtenons alors

$$\begin{aligned} \sum_p e^{-i\lambda f_p(S)} X_{pm}^k(S) &= \sum_{n \neq m} \sum_{q \neq m} \frac{e^{-i\lambda f_q(S)}}{\epsilon_m(S) - \epsilon_0(S)} \langle \hat{m}'(S) | \hat{n}(S) \rangle X_{qn}^{k-1}(S) \\ &\quad + i\lambda e^{-i\lambda f_m(S)} \sum_{n \neq m} \int_0^S ds' \langle \hat{m}'(s') | \hat{n}(s') \rangle X_{mn}^{k-1}(s'). \end{aligned} \quad (4.10)$$

où nous avons laissé tomber le terme de l'intégrant évalué à $t = 0$, qui peut être négligé, comme le montre [9].

Maintenant, nous supposons que nous pouvons identifier les différents facteurs des exponentielles pour scinder notre expression en deux parties : la partie où $q = m$ et la partie $q \neq m$. Cette étape est justifiée par la différence de phases des exponentielles ; puisque les exponentielles varient très rapidement dans les cas d'évolutions adiabatiques, elles seront très différentes après un certain temps et les facteurs d'exponentielles ayant la même phase seront nécessairement égaux. Puisque p couvre tout le spectre, la partie gauche de l'égalité (4.10) est nulle sauf si $p = q$ et $p = m$. Prenant ceci en considération :

$$\begin{aligned} X_{qm}^k(S) &= \sum_{n \neq m} \frac{\langle \hat{m}'(S) | \hat{n}(S) \rangle}{\epsilon_m(S) - \epsilon_0(S)} X_{qn}^{k-1}(S), \quad q \neq m \\ X_{mm}^k(S) &= i\lambda \sum_{n \neq m} \int_0^S ds' \langle \hat{m}'(s') | \hat{n}(s') \rangle X_{mn}^{k-1}(s'). \end{aligned} \quad (4.11)$$

Comme nous supposons que notre Hamiltonien est générique, le produit des

états sur la différence d'énergie de la première expression est de l'ordre de l'unité, alors que l'intégrale sur s' de la seconde expression est de l'ordre de S . Nous concluons donc qu'il y a deux grandeurs différentes pour un certain ordre :

$$\begin{aligned} X_{qm}^k(S) &\sim X_{qn}^{k-1}(S) \quad \text{pour } q \neq m \\ X_{mm}^k(S) &\sim \lambda S X_{mn}^{k-1}(S). \end{aligned} \quad (4.12)$$

C'est alors que l'on remarque que le premier indice de la matrice X , celui représentant la ligne, est le même sur les deux côtés de l'égalité. Cependant, nous avons deux relations différentes, une pour les q lignes et une pour la m ème ligne, ce qui nous laisse soupçonner un produit matricielle mais où la matrice multipliant X^{k-1} dépend de la ligne de X^k . Effectivement, on peut écrire les deux équations précédentes en une seule avec un produit matricielle particulier :

$$X_{pm}^k(S) = \sum_n X_{pn}^{k-1}(S) C_{nm}^p, \quad (4.13)$$

où C_{nm}^p est une matrice de 1, sauf sur la diagonale qui ne contient que des 0 et sur la p ème colonne qui contient seulement des λS .

$$C^p \sim \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & \cdots & \lambda S & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & 1 & \cdots & \lambda S & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & 0 & \cdots & \lambda S & 1 & \cdots & 1 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 0 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & \lambda S & 0 & \cdots & 1 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & \lambda S & 1 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

Cette remarque est très importante car elle implique un comportement particulier de l'ordre de grandeur des amplitudes. En prenant le carré de la matrice C^p , phénomène arrivant à chaque ordre pair, le terme dominant de chaque élément de

la matrice (sauf sur la p ème ligne) est λS . Cela implique que les termes dominants de X^{k-2} seront **tous** multipliés par λS dans X^k .

$$C^p \cdot C^p \sim \begin{pmatrix} \lambda S & \lambda S & \lambda S & \cdots & \lambda S & \lambda S & \cdots & \lambda S \\ \lambda S & \lambda S & \lambda S & \cdots & \lambda S & \lambda S & \cdots & \lambda S \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \lambda S & \lambda S & \lambda S & \cdots & \lambda S & \lambda S & \cdots & \lambda S \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & \lambda S & 1 & \cdots & 1 \\ \lambda S & \lambda S & \lambda S & \cdots & \lambda S & \lambda S & \cdots & \lambda S \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \lambda S & \lambda S & \lambda S & \cdots & \lambda S & \lambda S & \cdots & \lambda S \end{pmatrix}$$

En reportant cette remarque dans l'analyse des amplitudes (4.7), on constate qu'une amplitude d'ordre impair diminue d'un facteur $1/\lambda$ par rapport à l'amplitude de l'ordre précédent et qu'une amplitude d'ordre pair augmente d'un facteur S par rapport à l'amplitude de l'ordre précédent. Mathématiquement, lorsque k est pair,

$$A^k(S) \sim \left(\frac{S}{\lambda} \right)^{k/2}, \quad (4.14)$$

alors que pour k impair,

$$A^k(S) \sim \frac{1}{\lambda} \left(\frac{S}{\lambda} \right)^{(k-1)/2}. \quad (4.15)$$

Conclusion : la durée de l'évolution joue un rôle clé dans la validité de l'approximation adiabatique. Lorsque S est de l'ordre de λ , la probabilité qu'il y ait transition à un état autre que l'initial devient de l'ordre de 1 ! En terme des variables avec dimension, on peut affirmer que lorsque

$$T \sim E\tau^2 \quad (4.16)$$

l'approximation adiabatique n'est plus valide.

Par rapport au cas non-adiabatique, un système évoluant lentement gagne un facteur $E\tau$ sur le temps de dépeuplement de son état initial (voir la discussion

au chapitre précédent). On peut alors affirmer que l'approximation adiabatique n'est pas valide éternellement ; si on laisse suffisamment de temps à un système pour évoluer, il y aura nécessairement des transitions. Le fait que le système évolue lentement ne fait que prolonger le temps où celui-ci restera dans son état initial. On remarque également que plus l'échelle de temps caractéristique de l'Hamiltonien τ est grand, plus le système restera dans son état initial longtemps. Ceci appuie le théorème adiabatique ; si l'Hamiltonien varie infiniment lentement, alors on peut poser que le système évolue vers un état instantané final qui se déduit de son état instantané initial.

CHAPITRE 5

UN EXEMPLE : L'OSCILLATEUR HARMONIQUE AVEC UN CENTRE DE MASSE OSCILLANT

Cet exemple nous permet de calculer à chaque ordre la déviation par rapport à l'état initial du système. Il vient appuyer notre prédiction générale : l'amplitude diminue d'un facteur $1/\lambda$ à chaque ordre impair et augmente d'un facteur S à chaque ordre pair. De plus, puisque l'oscillateur harmonique ne permet qu'un saut de un niveau à chaque transition, on peut décomposer le chemin pris par le système selon l'ordre du développement perturbatif et le niveau d'énergie. On représente alors l'évolution sous une nouvelle forme schématique, qui nous permet pour chaque état final d'écrire l'ordre de l'amplitude à chaque ordre du développement perturbatif.

5.1 Le calcul de l'amplitude pour l'oscillateur

Notre système est un oscillateur harmonique dont le centre de masse oscille dans le temps. Contrairement aux systèmes habituellement étudiés pour l'approximation adiabatique qui sont à deux niveaux, ce système a l'avantage d'en posséder une infinité. L'Hamiltonien que nous étudierons dans ce chapitre a la forme suivante :

$$H(t) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}(x - a(t))^2 - \frac{\omega}{2}, \quad (5.1)$$

où $a(t)$ est le mouvement du centre de masse, dont nous imposons la forme

$$a(t) = a_0 \sin(\phi t). \quad (5.2)$$

La soustraction de $\omega/2$ fait en sorte que l'énergie du niveau fondamental est nulle. Les énergies et états propres solutions de l'équation de Schrödinger (3.1) pour ce

système sont :

$$\begin{aligned} E_n &= n\omega \\ |n(t)\rangle &= e^{-ipa(t)} |n\rangle \end{aligned} \quad (5.3)$$

où les $|n\rangle$ sont les états propres de l'Hamiltonien d'un oscillateur harmonique où le centre de masse est fixe, qui s'écrit en terme des polynômes d'Hermite. En fait, nos états propres ne sont qu'une translation de ces états.

Afin de pouvoir comparer les différents ordres de grandeur des termes en jeu, nous allons passer aux variables sans dimensions. Le temps caractéristique sera l'inverse de la fréquence de l'oscillation du centre de masse, $\tau = 1/\phi$. L'échelle d'énergie sera la fréquence de l'oscillateur, $E = \omega$. Ainsi, l'énergie sans dimension se trouve à être $\epsilon_n = n$. Le temps sans dimension est $s = t/\tau = \phi t$. On définit le temps total de l'évolution comme $S = T/\tau = \phi T$. Finalement, la variable nous permettant de suivre l'ordre de grandeur sera $\lambda = E\tau = \omega/\phi$, car $\lambda \gg 1$ pour les systèmes adiabatiques. Les intégrales sur l'énergie dans les facteurs de phases dynamiques auront la forme suivante :

$$\int_0^T dt E_n(t) = \lambda \int_0^S ds \epsilon_n(s) = \lambda n S. \quad (5.4)$$

Les autres facteurs d'importance dans le calcul de l'amplitude sont les termes du type

$$\begin{aligned} \langle \hat{m}'(s) | \hat{n}(s) \rangle &= \langle m | ip\dot{a}(s) e^{ipa(s)} e^{-ipa(s)} | n \rangle \\ &= i\dot{a}(s) \langle m | p | n \rangle, \end{aligned} \quad (5.5)$$

et puisque dans l'oscillateur harmonique, p est défini selon les opérateurs d'échelle

$$p = i\sqrt{\frac{m\omega}{2}}(a^\dagger - a), \quad (5.6)$$

on peut écrire

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{m}'(s) | \hat{n}(s) \rangle &= -\dot{a}(s) \sqrt{\frac{m\omega}{2}} (\sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} - \sqrt{n} \delta_{m,n-1}) \\
 &= a_0 \cos(s) \sqrt{\frac{m\omega}{2}} (\sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} - \sqrt{n} \delta_{m,n-1}), \quad (5.7)
 \end{aligned}$$

où à la dernière ligne, nous avons remplacé le $\dot{a}(s)$ par son expression posée au départ. Avec ce changement de variable, nous trouvons donc l'expression de l'amplitude de se retrouver à l'état m au k ième ordre à l'aide de (4.6) :

$$\begin{aligned}
 A_m^{(k)}(S) &= \sum_{n \neq m} \int_0^S ds_k e^{-i\lambda \int_{s_k}^S ds \epsilon_m(s)} \langle \hat{m}'(s_k) | \hat{n}(s_k) A_n^{(k-1)}(s_k) \\
 &= \sum_{n \neq m} \int_0^S ds_k e^{-i\lambda m(S-s_k)} a_0 \cos(s_k) \sqrt{\frac{m\omega}{2}} \\
 &\quad (\sqrt{n} \delta_{m,n-1} - \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1}) A_n^{(k-1)}(s_k). \quad (5.8)
 \end{aligned}$$

Nous ferons le calcul complet pour le premier ordre, les autres ordres ont été vérifiés mais on ne donnera ici que leur forme. L'état initial de notre système sera le niveau fondamental $|\psi(0)\rangle = |0(0)\rangle$ et donc à l'ordre 0,

$$|\psi(S)\rangle^{(0)} = |0(S)\rangle, \quad (5.9)$$

puisque l'énergie de l'état fondamental est nulle. Au premier ordre du développement perturbatif, le système n'a pas le choix de se retrouver dans l'état $n = 1$ à cause des opérateurs d'échelle impliqués dans l'amplitude :

$$A_m^{(1)}(S) = \int_0^S ds_1 e^{-i\lambda m(S-s_1)} a_0 \cos(s_1) \sqrt{\frac{m\omega}{2}} (-\delta_{m,1}). \quad (5.10)$$

La fonction delta de la dernière expression implique que $m = 1$, alors seulement

$A_1^{(1)}(S)$ est non nul :

$$\begin{aligned} A_1^{(1)}(S) &= \int_0^S ds_1 e^{-i\lambda(S-s_1)} a_0 \left(\frac{e^{is_1} + e^{-is_1}}{2} \right) \sqrt{\frac{m\omega}{2}} (-1) \\ &= -\sqrt{\frac{m\omega}{2}} \frac{a_0}{2} \left(\frac{e^{iS} - e^{-i\lambda S}}{i(1+\lambda)} - \frac{e^{-iS} - e^{-i\lambda S}}{i(1-\lambda)} \right). \end{aligned} \quad (5.11)$$

Les exponentielles étant de l'ordre 1, nous constatons que

$$O(A_1^{(1)}(S)) = 1/\lambda. \quad (5.12)$$

On peut donc représenter $A_1^{(1)}$ par le diagramme d'évolution suivant :

$$A_1^{(1)} \sim \frac{0}{t_1} \sqrt{\frac{1}{t_1}} \quad (5.13)$$

où le passage à un niveau supérieur implique un facteur de l'ordre de $1/\lambda$ dans la correction à l'évolution adiabatique.

Au deuxième ordre, on s'aperçoit que seuls les niveaux 0 et 2 sont accessibles au système :

$$A_m^{(2)}(S) = \int_0^S ds_2 e^{-i\lambda m(S-s_2)} a_0 \cos(s_2) \sqrt{\frac{m\omega}{2}} (\delta_{m,0} - \sqrt{2} \delta_{m,2}) A_1^{(1)}(s_2). \quad (5.14)$$

On sépare donc l'amplitude au deuxième ordre en deux : il y a l'amplitude de se retrouver au niveau fondamental et l'amplitude de se retrouver au niveau $n = 2$:

$$A_0^{(2)}(S) = \frac{-m\omega a_0^2}{8} \int_0^S ds_2 (e^{is_2} + e^{-is_2}) \left(\frac{e^{is_2} - e^{-i\lambda s_2}}{i(1+\lambda)} - \frac{e^{-is_2} - e^{-i\lambda s_2}}{i(1-\lambda)} \right), \quad (5.15)$$

$$A_2^{(2)}(S) = \frac{\sqrt{2}m\omega a_0^2}{8} e^{-2i\lambda S} \int_0^S ds_2 e^{2i\lambda s_2} (e^{is_2} + e^{-is_2}) \left(\frac{e^{is_2} - e^{-i\lambda s_2}}{i(1+\lambda)} - \frac{e^{-is_2} - e^{-i\lambda s_2}}{i(1-\lambda)} \right). \quad (5.16)$$

Si nous distribuons les termes des deux parenthèses de l'équation (5.15), certaines phases s'annulent et lorsque nous intégrons sur s_2 , ces termes deviennent des termes de l'ordre S/λ . Il y aura des termes en $1/\lambda$ si les exponentielles intégrées n'ont pas de λ dans leur facteur et des termes en $1/\lambda^2$ si les exponentielles contiennent un facteur $(1 \pm \lambda)$. Le terme dominant est donc S/λ .

Dans l'équation (5.16), toutes les exponentielles ont des facteurs $(1 \pm \lambda)$, donc en intégrant, elles donnent tous des termes en $1/\lambda^2$.

Le terme $A_0^{(2)}$ est représenté par le diagramme d'évolution suivant :

$$A_0^{(2)} \sim \begin{array}{c} 1 \\ \text{---} \\ 0 \quad t_1 \quad t_2 \quad 0 \end{array} \quad (5.17)$$

où, de la même manière que pour le terme $A_1^{(1)}$, le passage à un niveau supérieur implique un facteur de l'ordre de $1/\lambda$ dans la correction à l'évolution adiabatique, et le passage à un niveau inférieur implique un facteur S . Le facteur de correction total est donc S/λ .

Pour le terme $A_2^{(2)}$, on passe à un niveau supérieur deux fois, pour un facteur de correction total $1/\lambda^2$. Ce terme est représenté par le diagramme suivant :

$$A_2^{(2)} \sim \begin{array}{c} 2 \\ \text{---} \\ 1 \\ \text{---} \\ 0 \quad t_1 \quad t_2 \end{array} \quad (5.18)$$

Passons maintenant au troisième ordre du développement perturbatif :

$$A_m^{(3)}(S) = \sum_{n \neq m} \int_0^S ds_3 e^{-i\lambda m(S-s_3)} \langle \hat{m}'(s_3) | \hat{n}(s_3) \rangle A_n^{(2)}(s_3). \quad (5.19)$$

Nous savons que seulement $n = 0$ et $n = 2$ sont possibles, ce qui implique que m ne peut être qu'égal à 1 ou 3. Encore une fois, on sépare les amplitudes pour les

deux différents niveaux :

$$A_1^{(3)}(S) = \int_0^S ds_3 e^{-i\lambda(S-s_3)} a_0 \cos(s_3) \sqrt{\frac{m\omega}{2}} (-A_0^{(2)}(s_3) + \sqrt{2}A_2^{(2)}(s_3)), \quad (5.20)$$

$$A_3^{(3)}(S) = \int_0^S ds_3 e^{-3i\lambda(S-s_3)} a_0 \cos(s_3) \sqrt{\frac{m\omega}{2}} (-\sqrt{3}A_2^{(2)}(s_3)). \quad (5.21)$$

De la même manière que $A_2^{(2)}(S)$, $A_3^{(3)}(S)$ aura seulement des termes en $1/\lambda^3$ car toutes les exponentielles que nous intégrons comportent des facteurs λ . $A_1^{(3)}(S)$ aura des termes S/λ^2 venant des termes S/λ mais aussi des termes $1/\lambda^2$. Les autres termes seront de l'ordre $1/\lambda^2$ et $1/\lambda^3$. Le terme dominant est donc S/λ^2 .

5.2 Induction de la grandeur des A selon l'ordre et le niveau

Nous avons vu que l'ordre de grandeur de l'amplitude selon l'ordre de la perturbation dépendait de l'amplitude à l'ordre précédent. De plus, dans ce cas-ci, nous avons pu disséquer l'amplitude terme par terme pour voir les racines de son ordre de grandeur. On réalise en fait qu'un terme de l'ordre $1/\lambda^n$ ne pouvait que donner deux sortes de termes à l'ordre de perturbation supérieur : $1/\lambda^{n+1}$ si il y a une exponentielle ayant un facteur λ dans l'exposant, et S/λ^n si la phase est nulle. Ceci nous permet de projeter à tous les ordres de la perturbation le schéma de l'ordre de grandeur de l'amplitude. En effet, selon le niveau final du système et l'ordre de la perturbation, nous pouvons prédire l'ordre de grandeur de l'amplitude. Lorsque le système effectue une transition à un niveau moins énergétique, l'ordre de grandeur de l'amplitude augmente d'un facteur S car certaines phases s'annulent. Au contraire, lorsque le système effectue une transition à un niveau plus énergétique, l'ordre de grandeur de l'amplitude augmente d'un facteur $1/\lambda$. On peut représenter graphiquement ce résultat, comme on le voit à la figure 5.1.

On constate que les termes dominant à un certain ordre du développement perturbatif sont au niveau $n = 0$ ou $n = 1$. Cela illustre le fait qu'une résonance de deuxième ordre (où l'oscillateur saute au premier niveau et revient au niveau initial)

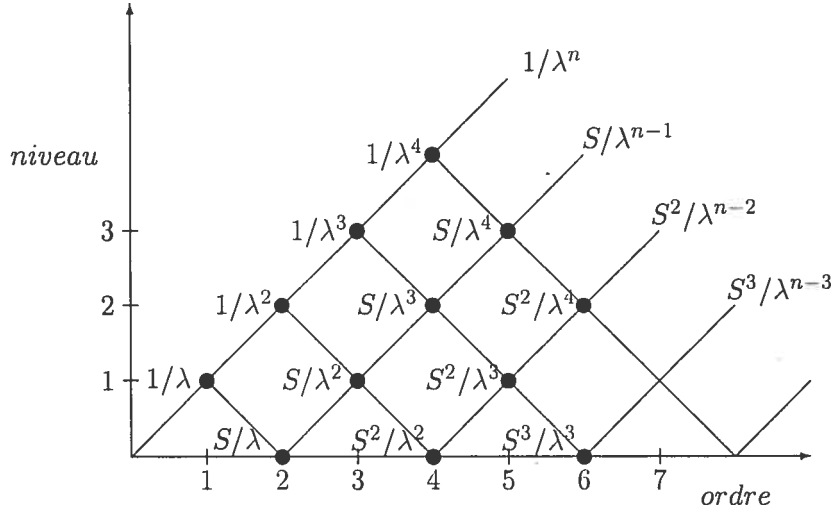


FIG. 5.1 – Niveaux possibles de l'oscillateur selon l'ordre, ainsi que l'ordre de grandeur pour chaque possibilité.

dominera nécessairement la grandeur de la correction à l'évolution adiabatique. À la lumière de ce schéma, on déduit que la probabilité de se retrouver à l'état final m peut être exprimé comme

$$A_m(S) = \frac{1}{\lambda^m} \sum_{i=0} c_n \left(\frac{S}{\lambda} \right)^i, \quad (5.22)$$

où c_n est le coefficient à cet ordre. On conclut donc que la série converge si $S \ll \lambda$. Le temps de dépeuplement S est de l'ordre de λ et si l'on revient aux variables avec dimensions, cela implique que $T = \omega/\phi^2$. Dans le cas d'une évolution non-adiabatique, le temps de dépeuplement de l'état initial est $T \sim 1/\phi$, nous gagnons donc un facteur $\omega/\phi = E\tau$ lorsque le système évolue adiabatiquement. C'est dans cette limite que le théorème adiabatique nous est utile, ce qui rejoint nos prédictions exprimées dans le chapitre 3 et 4 de ce mémoire.

En terminant, il est instructif de comparer cet exemple avec celui de Tong et al. Si l'amplitude de l'oscillation du centre de masse $a_0 \ll 1$ et que la phase de l'oscillation $s = \phi t$ varie rapidement, la condition *a priori* (2.19) est respectée car le produit (5.7) est petit. Cependant, cela n'est pas un système évoluant adiabati-

quement ; si on regarde les échelles de temps et d'énergie, on voit immédiatement que la condition $S \ll \lambda$ n'est pas remplie. C'est le même type de cas que nous avons étudié à la section 2.2 ; le système B représentait un champ magnétique tournant rapidement mais avec un petit angle d'ouverture autour de son axe de rotation. Ce système remplissait la condition *a priori*, malgré qu'il n'évolue pas de manière adiabatique. Dans le cas de l'oscillateur harmonique, si la phase de l'oscillation du centre de masse s varie lentement et que l'échelle d'énergie est suffisamment grande comparée à a_0 , alors on a un système réellement adiabatique.

CHAPITRE 6

CONCLUSION

Au cours de ces nombreuses pages, nous avons survolé le travail de plusieurs personnes, dont moi-même, qui ont donné à la physique quantique moderne un nouvel outil. Nous avons vu la source du théorème adiabatique ; nous avons raconté son origine et nous avons trouvé un critère de validité pour l'approximation qui lui est associée. Ensuite, vint la récente controverse sur son application. Le processus d'acquisition de connaissances est primordial à l'avancement de la science, et la remise en question en est une étape essentielle. Cette controverse a suscité un regain d'intérêt pour le théorème adiabatique, et une étude approfondie de ce sujet a été menée par de nombreux scientifiques. C'est donc grâce à elle que ce mémoire, ainsi que la nouvelle méthode de calcul et sa représentation en diagramme, ont vu le jour.

Ce sujet a évidemment été le thème central de ce mémoire. Nous avons développé en série la fonction d'onde de notre système, pour se rendre compte qu'à chaque ordre supplémentaire, notre système subissait une transition additionnelle. Entre chacune de ces transitions, l'évolution adiabatique régnait. Ce développement n'était cependant utile que si la série converge. Si elle divergeait, il serait impossible de la tronquer, les termes d'ordre supérieur étant aussi importants les uns que les autres, et l'approximation adiabatique ne serait qu'une vaine tentative. C'est pourquoi il a été décisif de démontrer la convergence de cette série.

À cette fin, nous avons réexprimé les amplitudes à tout ordre par une seule relation récurrente. L'analyse de cette expression a révélé un côté encore méconnu de l'approximation adiabatique ; le temps d'évolution total joue un rôle crucial sur sa validité. En effet, un système évoluant lentement peut subir des transitions d'une manière importante si on y laisse assez de temps. Le critère de convergence de la série indique en fait qu'un système adiabatique gagne sur son temps

de dépeuplement de l'état initial un facteur $E\tau$ par rapport à un système non-adiabatique.

De plus, l'étude de l'équation récurrente nous a dévoilé une caractéristique inattendue de l'ordre des amplitudes ; chaque terme d'ordre de développement impair est inférieur à son prédécesseur d'un facteur $1/\lambda$, alors que chaque terme d'ordre de développement pair est augmenté d'un facteur S par rapport à son prédécesseur. Afin de vérifier cette prédiction, nous avons étudié l'oscillateur harmonique avec un centre de masse oscillant. Non seulement nous avons confirmé toutes nos prédictions, mais nous avons également réussi à schématiser l'ordre de grandeur de l'amplitude selon le niveau d'énergie et l'ordre du développement. Ce schéma permet d'évaluer clairement l'amplitude de se trouver dans un certain état et ce, à tous les ordres.

Pour conclure, rappelons que tout ce travail a été fait lorsque certains auteurs ont suggéré l'incohérence du théorème adiabatique. Nous avons exposé dans ce travail que l'approximation adiabatique est valide lorsqu'on l'applique à un système évoluant lentement. En cas de doute, on peut toujours utiliser le critère de convergence de la série, qui se rapporte en fait aux différentes échelles en jeu : $S \ll \lambda$.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] A.Bohm, A.Mostafazadeh, H.Koizumi, Q.Niu, and J.Zwanziger. *The Geometric Phase in Quantum Systems*. Springer, 2003.
- [2] M.V. Berry. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proc. R. Soc. A*, 392 :45–57, 1984.
- [3] E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann, J. Lapan, A. Lundgren, and D. Preda. A quantum adiabatic evolution algorithm applied to random instances of an np-complete problem. *Science*, 292 :472–476, 2001.
- [4] J.Mehra and H.Rechenberg. *The Historical Developpement of Quantum theory, volume 1-part 1*. Springer-Verlag, 1982.
- [5] K.P. Marzlin and B.C. Sanders. Inconsistancy in the application of the adiabatic theorem. *Phys. Rev. Lett.*, 93 :160408, 2004.
- [6] M.Born and V.Fock. Beweis des adiabatensatzes. *Z. Phys.*, 51 :165–169, 1928.
- [7] A. Messiah. *Mécanique quantique-tome 2*. Dunod, 1964.
- [8] A.K. Pati and A.-K. Rajagopal. Inconsistencies of the adiabatic theorem and the berry phase. *ArXiv*, page 0411152, 2004.
- [9] J. Pinel. *Mémoire : étude sur la validité de l'approximation adaibatique*. Université de Montréal, 2006.
- [10] R.MacKenzie, A.Morin-Duchesne, H. Paquette, and J.Pinel. Titre à venir. *x*, x :x, 2007.
- [11] R.MacKenzie, E. Marcotte, and H. Paquette. A new perturbative approach to the adiabatic approximation. *Phys. Rev. A*, 73 :042104, 2006.
- [12] M.S. Sarandy, L.-A. Wu, and D.A. Lidar. Consistency of the adiabatic theorem. *Quant. Inform. Proc.*, 3 :331, 2004.
- [13] S.Duki, H.Mathur, and O.Narayan. Is the adiabatic approximation inconsistent ? *ArXiv*, page 0510131, 2006.

- [14] D. M. Tong, K. Singh, L. C. Kwek, and C. H. Oh. Quantitative conditions do not guarantee the validity of the adiabatic approximation. *ArXiv*, 1(3) :195–200, 2005.
- [15] Y. Aharonov and D. Bohm. Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory. *Phys. Rev.*, 115 :485–491, 1959.